

HARTREE - FOCK RECHNUNGEN
FÜR DAS ZWIELEKTRONENSYSTEM
IM HOMOGENEN MAGNETFELD

*Diss Erlangen
1983*

von

Günther Thurner

aus

Nürnberg

1983 # 230



HARTREE - FOCK RECHNUNGEN FÜR DAS ZWEELEKTRONENSYSTEM IM HOMOGENEN MAGNETFELD

Den Naturwissenschaftlichen Fakultäten
der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

zur

Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt

von

Günther Thurner

aus

Nürnberg

Als Dissertation genehmigt von den Naturwissenschaftlichen
Fakultäten der Universität Erlangen-Nürnberg

Tag der mündlichen Prüfung: 4.5.1983

Vorsitzender der Promotionskommission: Prof. Dr. K. Jacobs

Erstberichterstatte: Prof. Dr. H. Ruder

Zweitberichterstatte: Prof. Dr. M. Börner

Prof. Dr. E. Trefftz

(Max-Planck-Institut für Physik

und Astrophysik Garching)

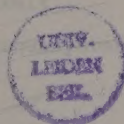
Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird damit begonnen, die Atomphysik des Zweielektronenproblems in beliebigen homogenen Magnetfeldern zu erarbeiten. Um die atomphysikalischen Größen Niveaustruktur, Wellenfunktionen und elektromagnetische Übergänge in ihrer kontinuierlichen Abhängigkeit von der Magnetfeldstärke angeben zu können, wird zunächst die Zuordnung zwischen den Zuständen im feldfreien Fall und im extrem starken Magnetfeld mit Hilfe der Wignerschen Non-Crossing-Rule durchgeführt.

Anschließend werden die Hartree-Fock Gleichungen bei Vorliegen eines äußeren Magnetfeldes abgeleitet, wobei für die Wellenfunktionen ein kugelsymmetrischer Ansatz gewählt wurde. Zur numerischen Lösung dieser Hartree-Fock Gleichungen wurde ein bestehendes Hartree-Fock Programm umgearbeitet.

Weiterhin werden die Gleichungen zur Berechnung der Dipolstärken und Oszillatorstärken elektromagnetischer Dipolübergänge mit numerischen Hartree-Fock Wellenfunktionen für das Zweielektronensystem abgeleitet.

Mit 1- und 2(3)-Konfigurationsansätzen werden die Gesamtenergien einiger Zustände mit den magnetischen Quantenzahlen $m = 0, -1, -2$ und -3 berechnet, und sowohl tabellarisch als auch graphisch für den Bereich von $10^{-4} \leq \beta_Z \leq 10^3$ aufgetragen. Für die 3 tiefsten Zustände mit $m = -1, -2$ und -3



wird durch eine $\frac{1}{Z}$ -Entwicklung ihre Z-Abhängigkeit untersucht und die Entwicklungskoeffizienten für einige Magnetfeldstärken werden tabellarisch aufgeführt.

Wellenlängen und Oszillatorstärken einiger Dipolübergänge werden am Beispiel von He I diskutiert und mit Literaturwerten verglichen.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
I. Die Zuordnung zwischen den Zuständen im feldfreien Fall und im extrem starken Magnetfeld	6
I.1. Darstellung der Energie eines Zustandes in Abhängigkeit von β_z und $\frac{1}{2}$	8
I.2. Definition der zu betrachtenden Bereiche	10
I.3. Erläuterung der Zustände, die betrachtet werden	19
I.4. Die Zuordnungsvorschrift für den allgemeinen Fall	23
II. Die Hartree-Fock Methode bei Anwendung auf Ionen und Atome im äußeren Magnetfeld	41
II.1. Der Hamiltonoperator mit äußerem Magnetfeld	41
II.2. Konstruktion der Wellenfunktionen des Hamiltonoperators	43
II.3. Matrixelemente des Hamiltonoperators	45
II.4. Die Hartree-Fock Gleichungen	52
III. Dipolstärken, Oszillatorstärken und Übergangswahrscheinlichkeiten	56
III.1. Dipolmatrixelemente	56
III.2. Oszillatorstärke und Übergangs- wahrscheinlichkeit	58
III.3. Das Zweielektronensystem	59

IV.	Programmbeschreibung	63
IV.1.	Multikonfiguration Hartree-Fock Programm mit Magnetfeld	63
IV.2.	Numerische Berechnung der Dipolstärke und Oszillatorstärke eines Dipolübergangs	71
V.	Ergebnisse	74
V.1.	Energieniveaus von Zweielektronensystemen im homogenen Magnetfeld bei einem 1-Konfigurationsansatz	75
V.2.	Einfluß von Konfigurationsmischungen	100
V.3.	Wellenlängen und Oszillatorstärken	109
VI.	Anhang	118
VI.1.	Koeffizienten c^2 zur Berechnung der Matrix- elemente des diamagnetischen Terms	118
VI.2.	Berechnung der Koeffizienten $c_{s,\alpha}^{MS}$ mit Hilfe der Projektionsmethode	119
VI.3.	Liste der Bilder	122

Literaturverzeichnis

Einleitung

Die Entdeckung riesiger Magnetfelder bei Weißen Zwergsternen ($B \approx 10^6 - 10^8 \text{ G}$) und Neutronensternen ($B \approx 10^{11} - 10^{13} \text{ G}$) hat den Physikern die einzigartige Möglichkeit eröffnet, Materie unter Bedingungen zu studieren, wie sie in irdischen Labors niemals zu verwirklichen sind. Solche enormen Feldstärken hatte man für diese kompakten kosmischen Objekte - Endstadien der Sternentwicklung - schon lange theoretisch vorhergesagt. Nimmt man nämlich an, daß beim Gravitationskollaps eines normalen Sterns (Radius $R \approx 10^6 \text{ km}$) zu einem Weißen Zwergstern ($R \approx 10^4 \text{ km}$) oder zu einem Neutronenstern ($R \approx 10 \text{ km}$) näherungsweise magnetische Flußerhaltung gilt - eine Annahme, die wegen der hohen Leitfähigkeit der Sternmaterie gerechtfertigt ist -, so ergibt sich sofort, daß das Magnetfeld zusammen mit der Materie komprimiert und um einen Faktor 10^4 bzw. 10^{10} verstärkt wird. Bei möglichen Ausgangsfeldern von etwa $10^2 - 10^3 \text{ G}$ erhält man so automatisch Felder bis zu 10^7 G bei Weißen Zwergen, bzw. 10^{13} G bei Neutronensternen.

Weißer Zwergsterne, von denen man inzwischen mehrere Tausend kennt, werden nach Spektraltypen gemäß ihrer spektroskopischen Eigenschaften und Farben klassifiziert. In den meisten Fällen verläuft dieses Klassifikationsschema analog dem der Hauptsequenzsterne. Da Sterne zeigen überwiegend Wasserstoffspektren. Etwa $2/3$ der magnetischen Weißen Zwergsterne gehö-

ren zum DA-Typ, und für sie liegen bereits zahlreiche theoretische Untersuchungen vor. Weiße Zwergsterne, die vor allem Linien von He I aufweisen, werden als DB klassifiziert. Eine ausführliche Zusammenfassung der Klassifikationstypen und der bisher entdeckten, magnetischen Weißen Zwergsterne ist einem Artikel von R.H. Garstang [1] zu entnehmen; an dieser Stelle wird nicht weiter darauf eingegangen.

Der Nachweis der Felder und die Bestimmung ihrer Größe gründet sich bei Weißen Zwergen auf die Messung der Aufspaltung von Spektrallinien und der zirkularen Polarisierung im optischen und im extremen UV-Bereich [1,2]. Der Nachweis von Feldstärken in der Größenordnung 10^{12} G bei Neutronensternen erfolgte dagegen zunächst indirekt über die beobachtete Zunahme der Rotationsperiode von Radiopulsaren, die durch den Verlust von Rotationsenergie via magnetischer Dipolstrahlung erklärt werden kann [3]. Der erste direkte Nachweis für diese riesigen Magnetfelder gelang dann 1976 durch die Entdeckung einer verbreiterten Linie bei etwa 50 keV im Spektrum der im Sternbild Herkules gelegenen, pulsierenden Röntgenquelle Her X-1 [4]. Als einziger möglicher Mechanismus für die Erzeugung dieser spektralen Struktur verblieb der Zyklotronprozeß von Elektronen in einem heißen, stark magnetisierten Plasma, und mit $\hbar\omega_B \approx 50$ keV ergab sich ein Magnetfeld von $B \approx 5 \cdot 10^{12}$ G. Erwähnt sei dabei, daß die Röntgenleuchtkraft dieser Quelle das 10^4 -fache der Leuchtkraft unserer Sonne im gesamten Spektralbereich beträgt, und daß die Röntgenstrahlung aus einem Gebiet kleiner als 1 km^3 stammt, mit Plasmatemperaturen von 10^8 K. Es handelt sich bei

Her X-1 um einen Neutronenstern, der mit einer Periode von 1.24 s rotiert und in 1.70 Tagen um einen normalen Stern umläuft; die von diesem Stern auf die Magnetpole des Neutronensterns überströmende Materie erreicht Freifallgeschwindigkeiten von etwa 40% der Lichtgeschwindigkeit, und die Umwandlung der kinetischen Energie von 10^{11} Tonnen hineinstürzender Materie pro Sekunde beim Aufprall auf die Neutronensternoberfläche liefert die Energie für die emittierte Röntgenstrahlung. Einen weiteren Superlativ von Neutronensternen erkennt man, wenn man sich vergegenwärtigt, daß die Energiedichte eines Magnetfeldes von $5 \cdot 10^{12}$ G einer Ruhemasse von 10^3 g/cm^3 äquivalent ist, also der tausendfachen Dichte von Wasser. Ein Kubikzentimeter Magnetfeld dieser Stärke würde demnach bei heutigen Energiepreisen rund fünf Milliarden DM kosten!

Nach diesen kosmischen Höhenflügen wollen wir nun den Einfluß der extrem starken Magnetfelder auf die Struktur der Atome diskutieren. Um ein erstes Gefühl für die auftretenden Größenordnungen zu bekommen, vergleichen wir die Energie $\hbar\omega_B = \hbar eB/m_e$ der quantisierten Gyrationbewegung eines Elektrons im Magnetfeld mit der für die Coulomb-Bindung typischen Rydberg-Energie $E_H = \alpha^2 m_e c^2 / 2 \approx 13.6 \text{ eV}$ (α =Feinstrukturkonstante). Diesem Vorgehen liegt der Gedanke zugrunde, daß allgemein physikalische Gebilde stabil gegenüber dem Einfluß äußerer Störungen sind, wenn die mit den Störungen verbundenen Energien wesentlich kleiner sind als die charakteristischen Energien des Systems. Unter diesem Gesichtspunkt müssen wir

daher solche Magnetfelder als extrem stark bezeichnen, für die $\hbar\omega_B \gtrsim E_H$ gilt, d.h. Magnetfelder mit $B \gtrsim B_0 = 2\alpha^2 m_e^2 c^2 / e\hbar \approx 4.70 \cdot 10^9 \text{ G}$.

Das Referenzfeld B_0 ist konventionsgemäß so gewählt, daß $\hbar\omega_{B_0}$ gleich dem Vierfachen der Rydberg-Energie ist. Die Magnetfelder Weißer Zwerge sind offensichtlich mindestens 10 bis 100 mal kleiner als B_0 . Dies ist gerade der Bereich, wo die störungstheoretische Behandlung (quadratischer Zeeman-Effekt) selbst für niedrigliegende Zustände zusammenbricht. Die Magnetfelder von Neutronensternen liegen 2 bis 3 Zehnerpotenzen über B_0 , so daß hier die Coulomb-Bindungskräfte der Materie durch die Lorentz-Kräfte der Magnetfelder bei weitem dominiert werden. Die Folge davon ist eine vollständige Änderung der Struktur der Atome. Damit liegt auf der Hand, daß die Neuberechnung aller physikalischen Eigenschaften von Materie in starken Magnetfeldern notwendig wird. Die Ergebnisse solcher Anstrengungen sind die unerläßliche Voraussetzung für astrophysikalische Modellrechnungen, die darauf abzielen, aus den beobachteten Spektren zuverlässige Rückschlüsse auf die physikalischen Verhältnisse in den Emissionsgebieten zu ziehen.

Neben der mehr anwendungsorientierten astrophysikalischen Bedeutung stellt das Problem der Materie in extrem starken Magnetfeldern bereits für sich genommen ein neues faszinierendes Kapitel der Quantenmechanik dar. Nachdem für das Einelektronenproblem die Untersuchung der gesamten Niveaustuktur, der Wellenfunktionen und der elektromagnetischen

Übergänge in ihrer kontinuierlichen Abhängigkeit vom Magnetfeld bereits ausführlich u.a. von G. Wunner et al. [5,6,7,8], S.H. Kara, M.R.C. McDowell [9], W. Rösner et al. [10,11] und J. Simola et al. [12] durchgeführt worden ist, wird in dieser Arbeit damit begonnen, die Atomphysik im homogenen Magnetfeld für das Zweielektronensystem zu erarbeiten.

I. Die Zuordnung zwischen den Zuständen im feldfreien Fall und im extrem starken Magnetfeld.

Ein Anliegen dieser Arbeit ist es, eine vollständige Beschreibung des Zweielektronensystems im äußeren Magnetfeld B zu geben. Zu diesem Zweck untersuchen wir die Eigenschaften des Zweielektronensystems in Abhängigkeit von zwei kontinuierlichen Parametern, der Stärke des äußeren Magnetfeldes B und der elektrostatischen Elektron-Elektron Wechselwirkung. Innerhalb dieser Arbeit sollen nur Zustände betrachtet werden, die keine Möglichkeit der Autoionisierung besitzen, da wir mit unserem Ansatz keine Kontinuumszustände berücksichtigen können. Aus diesem Grund wollen wir nur Triplettzustände untersuchen, da die Singulettzustände wegen der zum Magnetfeld proportionalen Spineinstellenergie mit zunehmendem Magnetfeld in das nächste Landauniveau übergehen und im Kontinuum des nullten Landauniveaus liegen, auf das wir uns beschränken wollen. Der quantitative Verlauf der tiefsten Singulettzustände wird später noch angegeben.

Es soll nun versucht werden, den Verlauf der Energieniveaus der Triplettzustände des Zweielektronensystems ausgehend vom feldfreien Fall mit $B = 0$ bis zu Magnetfeldstärken mit $B \leq 10^3 Z^2 B_0$ als kontinuierliche Funktion von B bei festgehaltener Stärke der Elektron-Elektron Wechselwirkung darzustellen.

Die Stärke des Magnetfeldes B wird in dieser Arbeit in Einheiten des Referenzfeldes B_0 bzw. $B_0 Z^2$ angegeben.

$$\beta := \frac{B}{B_0} \quad \text{bzw.} \quad \beta_Z := \frac{B}{B_0 Z^2} = \frac{\beta}{Z^2} \quad (\text{I.1})$$

Wenn das Magnetfeld B größer wird als B_0 , wird der Larmorradius der Bewegung eines Elektrons in einer zum Magnetfeld senkrechten Ebene kleiner als der Bohrsche Radius beim Wasserstoffatom, und die magnetische Wechselwirkung des Elektrons in einem Wasserstoffatom beginnt seine Coulombwechselwirkung mit dem Proton zu dominieren.

Die Stärke der elektrostatischen Elektron-Elektron Wechselwirkung wird durch die Kernladungszahl Z des Zweielektronensystems charakterisiert. Für $\frac{1}{Z} = 0$ ist die elektrostatische Elektron-Elektron Wechselwirkung abgeschaltet und nimmt mit kleiner werdender Kernladungszahl Z zu. Den Verlauf der Energieniveaus wollen wir im Bereich $0 \leq \frac{1}{Z} \leq 1$ bei festgehaltenem β_Z untersuchen.

I.1. Darstellung der Energie eines Zustandes in Abhängigkeit von β_Z und $\frac{1}{Z}$.

Die Energie E eines Zustandes des Zweielektronensystems ist abhängig von β_Z und $\frac{1}{Z}$ und kann durch eine Fläche im dreidimensionalen Raum, der durch die Koordinatenachsen E , $\frac{1}{Z}$ und β_Z aufgespannt wird, dargestellt werden.

$$E = E \left(\frac{1}{Z}, \beta_Z \right) \quad (\text{I.2})$$

Die Schnittlinien dieser Fläche mit der $\beta_Z = 0$ und der $\frac{1}{Z} = 0$ Ebene liefern den Verlauf der Energie in Abhängigkeit vom entsprechenden Parameter, wenn der andere Parameter abgeschaltet ist. In Bild 1 ist diese Fläche für den Grundzustand des Zweielektronensystems dargestellt (Tripletzustand).

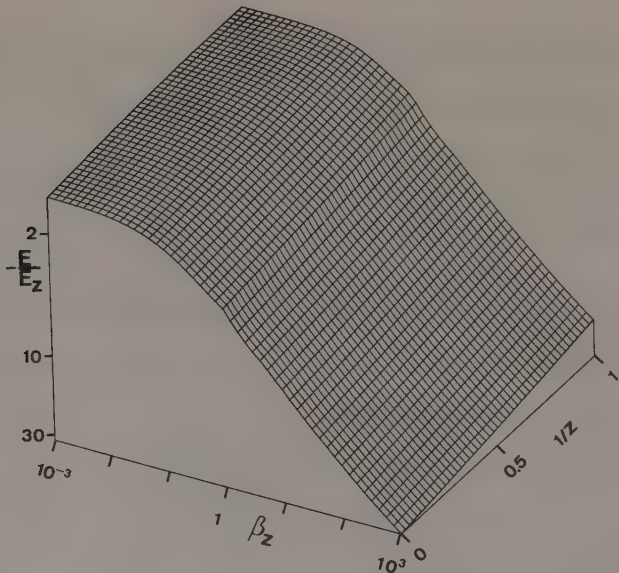


Bild 1: Gesamtenergie des Tripletzustandes mit

$m = -1$ in Abhängigkeit von β_Z und $\frac{1}{Z}$ ($E_Z = Z^2 E_H$).

In der $\beta_Z = 0$ Ebene erhalten wir die Energie E in Abhängigkeit von der Kernladungszahl Z für den feldfreien Fall. Wir können hiermit also den Einfluß der elektrostatischen Elektron-Elektron Wechselwirkung auf den Verlauf der Energie studieren.

In der $\frac{1}{Z}$ Ebene erhalten wir die Energie E in Abhängigkeit von β_Z bei abgeschalteter, elektrostatischer Elektron-Elektron Wechselwirkung. Die Gesamtenergie des Zweielektronensystems ist hierbei einfach die Summe der Energien der Zustände des Einelektronensystems mit der Kernladungszahl Z im homogenen Magnetfeld der Stärke β_Z .

Um den richtigen Verlauf der Energieniveaus als Funktion von β_Z und von $\frac{1}{Z}$ zu bekommen, ist es notwendig, die asymptotische Zuordnung der Zustände zwischen den verschiedenen Bereichen zu kennen. Diese Zuordnung zwischen den Zuständen gelingt durch Anwendung der Wignerschen Non-Crossing-Rule der Quantenmechanik auf die beiden kontinuierlichen Parameter β_Z und $\frac{1}{Z}$.

Entsprechend dieser Regel können sich zwei Zustände, deren Energieniveaus eine Funktion eines kontinuierlichen Parameters sind, nicht kreuzen, falls sie die gleichen Quantenzahlen besitzen, die gemäß den Symmetriebedingungen des zugehörigen Hamiltonoperators erhalten bleiben.

I.2. Definition der zu betrachtenden Bereiche

Die Definition der verschiedenen zu betrachtenden Bereiche und ihre Charakterisierung durch die jeweils guten Quantenzahlen wird im folgenden angegeben, wobei zunächst die vier Bereiche definiert werden:

$$2.1. \quad \beta_Z = 0 \quad \text{und} \quad \frac{1}{Z} = 0 \quad E = E(\beta_Z = 0; \frac{1}{Z} = 0)$$

Auf der E-Achse liegen alle Energieniveaus der feldfreien Zustände ohne elektrostatische Elektron-Elektron Wechselwirkung.

$$2.2. \quad \beta_Z > 0 \quad \text{und} \quad \frac{1}{Z} = 0 \quad E = E(\beta_Z; \frac{1}{Z} = 0)$$

In der $\frac{1}{Z} = 0$ Ebene erhält man die Abhängigkeit der Energieniveaus von β_Z ohne elektrostatische Elektron-Elektron Wechselwirkung.

$$2.3. \quad \beta_Z = 0 \quad \text{und} \quad 0 < \frac{1}{Z} \leq 1 \quad E = E(\beta_Z = 0; \frac{1}{Z})$$

In der $\beta_Z = 0$ Ebene erhält man für den feldfreien Fall die Abhängigkeit der Energieniveaus von der elektrostatischen Elektron-Elektron Wechselwirkung.

$$2.4. \quad \beta_Z > 0 \quad \text{und} \quad 0 < \frac{1}{Z} \leq 1 \quad E = E(\beta_Z; \frac{1}{Z})$$

In diesem Fall erhält man die Energie bei beliebiger Magnetfeldstärke und Kernladungszahl.

zu 2.1. Die Zustände des Zweielektronensystems können in diesem Fall durch die Eielektronenzustände charakterisiert werden, die folgende gute Quantenzahlen besitzen:

$n_1 l_1 m_1 s_1 m_{s_1}$ für Elektron 1 und

$n_2 l_2 m_2 s_2 m_{s_2}$ für Elektron 2.

Für den feldfreien Fall wird im Bild 2 das Spektrum des Wasserstoffatoms (Eielektronensystem) angegeben. Die Energie E_i in Einheiten von $E_H \cdot Z^2$ des Elektrons i beträgt $E_i = -\frac{1}{n_i^2}$, sodaß die Gesamtenergie E_{tot} des Zweielektronensystems wie folgt lautet:

$$E_{\text{tot}} = -\left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2}\right) \quad (\text{I.3})$$

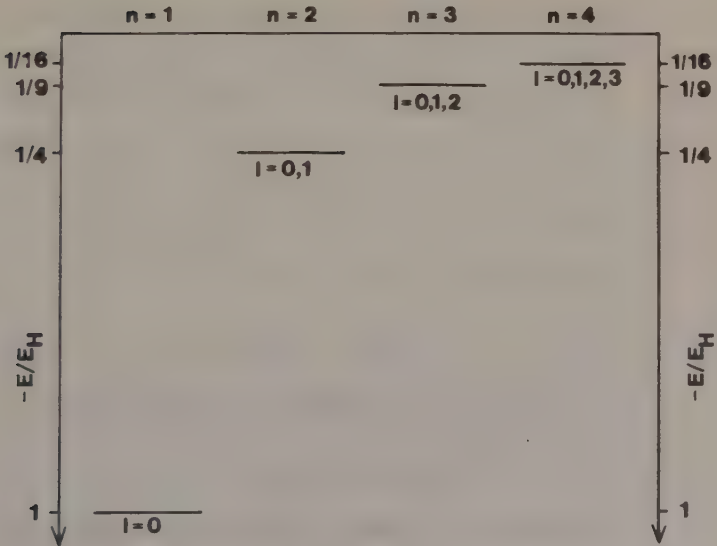


Bild 2: Spektrum des H-Atoms im feldfreien Fall.

Die Zustände zeigen l , m , s und m_s -Entartung.

Gute Quantenzahlen sind die Parität P und die longitudinale z -Parität π , die wie folgt definiert sind:

$$P = (-1)^{l_1 + l_2} \quad \pi = (-1)^{l_1 + m_1 + l_2 + m_2} \quad (\text{I.4})$$

zu 2.2. Die Zustände des Zweielektronensystems können in diesem Fall ebenfalls durch die Eielektronenzustände charakterisiert werden. Beim Einschalten des Magnetfeldes ist der Bahndrehimpuls l_i des Elektrons i keine gute Quantenzahl mehr, sondern nur noch seine Projektion auf die Magnetfeldrichtung, die magnetische Quantenzahl m_i . Die longitudinale z -Parität π ist weiterhin gute Quantenzahl, während die Parität P nicht erhalten bleibt. Der Verlauf der Energieniveaus des Zweielektronensystems in der $\frac{1}{Z} = 0$ Ebene in Abhängigkeit von β_Z kann durch Summation der entsprechenden Eielektronenenergien angegeben werden, die für das Wasserstoffatom in Abhängigkeit von β_Z von W. Rösner [10] sehr genau berechnet wurden. Das Spektrum für das Wasserstoffatom im Magnetfeld wird für 5 verschiedene Feldstärken ($\beta_Z = 0, 1, 10, 100, 1000$) im Bild 3 angegeben. Für jeden Wert von m erhält man einen Zustand mit der z -Parität $\pi = +1$ und verschwindender Knotenzahl v der longitudinalen Wellenfunktion, dessen Energie mit wachsendem Magnetfeld stark abgesenkt wird. Diese Zustände be-

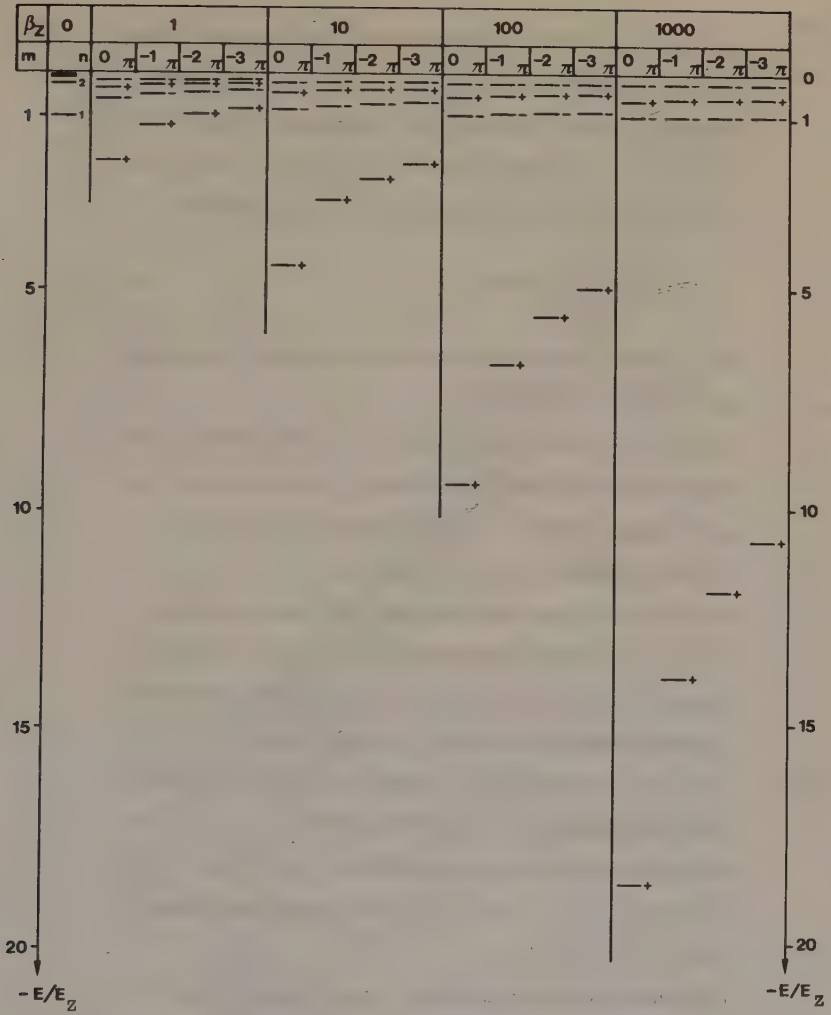


Bild 3: Spektrum des H-Atoms im Magnetfeld

zeichnet man als Tightly-Bound. Über jedem Tightly-Bound Zustand findet man für alle β_Z ein wasserstoffähnliches Spektrum von Zuständen, deren Energien betragsmäßig weniger als 1 Rydberg betragen. Mit Hilfe des Skalengesetzes für die Energie

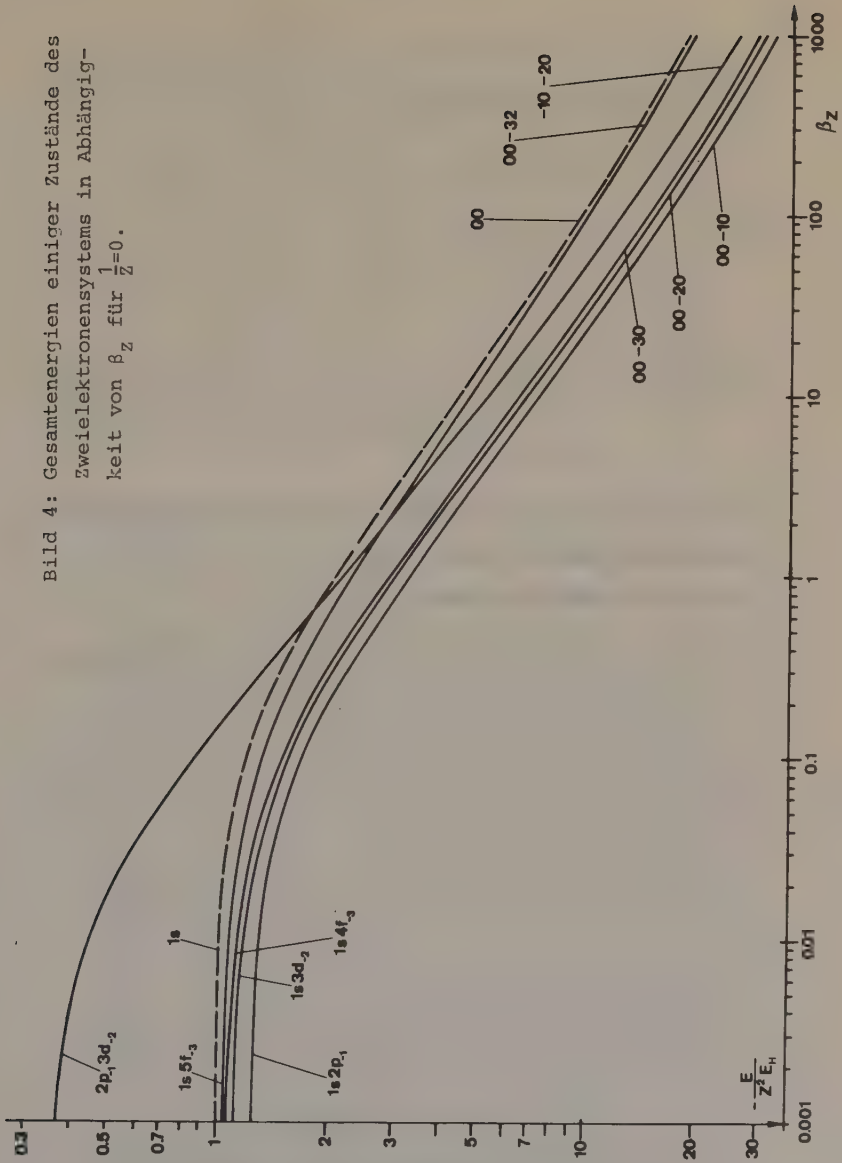
$$E(Z, \beta_Z) = Z^2 E(Z=1, \beta_Z) \quad (I.5)$$

erhält man die zugehörigen Energien für beliebige Kernladungszahlen Z .

Im Bild 4 sind nun die durch die Addition der Ein-elektronenenergien berechneten Energien des Zweielektronensystems in Abhängigkeit von β_Z für einige Zustände von $m = -1$ bis $m = -3$ ($m = m_1 + m_2$) aufgetragen, was dem Verlauf der Energieniveaus in der $\frac{1}{Z} = 0$ Ebene entspricht. Weiterhin wurde in dieses Bild das Ionisierungsniveau des Zweielektronensystems gestrichelt eingetragen. Die Zuordnung der Zustände des feldfreien Falls und der im starken Magnetfeld erfolgte gemäß der Wignerschen Non-Crossing-Rule und entspricht der bereits von Virtamo [12] für das Einelektronensystem angegebenen Vorschrift.

Die Zuordnung der im Bild 4 angegebenen Zustände zwischen dem feldfreien Fall und dem im extrem starken Magnetfeld ist aus folgender Tabelle 1 zu entnehmen.

Bild 4: Gesamtenergien einiger Zustände des
Zweielektronensystems in Abhängig-
keit von β_Z für $\frac{1}{Z}=0$.



$$\beta_Z = 0$$

$$\beta_Z \gg 1$$

$n_1 l_1 m_1$	$n_2 l_2 m_2$	Bezeichnung	$m_1 v_1$	$m_2 v_2$	Bezeichnung	π
1 0 0	2 1 -1	1s 2p	0 0	-1 0	00 -10	+1
1 0 0	3 2 -2	1s 3d	0 0	-2 0	00 -20	+1
1 0 0	4 3 -3	1s 4f	0 0	-3 0	00 -30	+1
1 0 0	5 3 -3	1s 5f	0 0	-3 2	00 -32	+1
2 1 -1	3 2 -2	2p 3d	-1 0	-2 0	-10 -20	+1

Tabelle 1 : Zuordnung der im Bild 4 angegebenen Zustände bei abgeschalteter Elektron-Elektron Wechselwirkung ($1/Z=0$)

Bemerkung: Die in den Tabellen nicht angegebenen Quantenzahlen besitzen für alle Zustände im nullten Landau-niveau folgende Werte: $s_i = \frac{1}{2}$, $m_{s_i} = -\frac{1}{2}$ $i = 1, 2$

Die Zustände 1s5f bzw. 00-32 und 2p3d bzw. -10-20 haben die gleiche Summe m der magnetischen Quantenzahlen m_i und gleiche longitudinale z -Parität π . Der Kreuzungspunkt der beiden Zustände bei $\beta_Z = 2.0$ widerspricht aber nicht der Non-Crossing-Rule, da in der $\frac{1}{Z} = 0$ Ebene die Zustände durch ihre verschiedenen Eielektronenzustände unterschieden werden können. Schaltet man die elektrostatische Elektron-Elektron Wechselwirkung ein, d.h. man geht aus der $\frac{1}{Z} = 0$ Ebene heraus, so erlangt dieser Kreuzungspunkt eine besondere Bedeutung, die in Punkt I.4.4. erläutert wird.

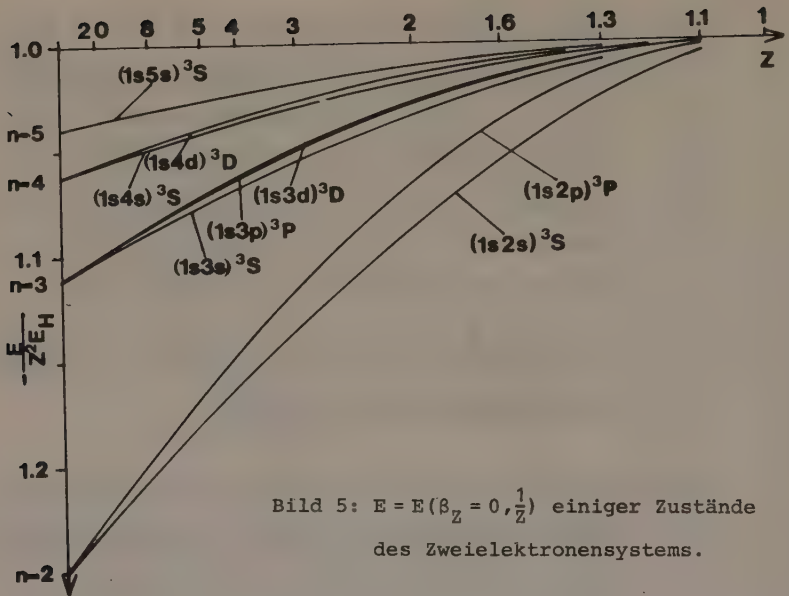
Die Zustände $1s n_2 l_2$ und $1s n_2 l_2'$ sind für $\beta_Z = 0$ und $\frac{1}{Z} = 0$ entartet. Beim Einschalten des Magnetfeldes wird die Entartung aufgehoben, und der Zustand mit dem

höheren Drehimpuls wird energetisch stärker abgesenkt als derjenige mit dem kleineren Drehimpuls, wenn sie gleiche magnetische Quantenzahl m haben. Als Beispiel seien hier die beiden Zustände $1s3s$ und $1s3d$ mit der Parität $P = +1$ und der magnetischen Quantenzahl $m_2 = 0$ erwähnt, bei denen also $1s3d$ stärker abgesenkt wird als $1s3s$. Deshalb werden wir in der $\frac{1}{Z} = 0$ Ebene die feldfreien Zustände $1s3d$ und $1s3s$ den Zuständen 00 04 und 00 06 im extrem starken Magnetfeld zugeordnet.

zu 2.3. Durch Einschalten der elektrostatischen Elektron-Elektron Wechselwirkung sind die Einzeldrehimpulse l_i des Zweielektronensystems im feldfreien Fall keine guten Quantenzahlen mehr, sondern nur noch der Gesamtdrehimpuls L , zu dem die Einzeldrehimpulse l_i über den Operator der elektrostatischen Wechselwirkung $\frac{1}{r_{12}}$ gekoppelt werden. Die Parität P und die longitudinale z -Parität π sind weiterhin gute Quantenzahlen. Die Entartung der Zustände liegt nur noch bezüglich der magnetischen Quantenzahl m vor.

Im Bild 5 ist für einige Zustände der Verlauf der Energie in Abhängigkeit von $\frac{1}{Z}$ für $\beta_Z = 0$ aufgetragen. Die Energien werden durch einen Einkonfigurations-Hartree-Fock-Ansatz berechnet.

Für das H^- -Ion, d.h. bei $\frac{1}{Z} = 1$, existiert also kein gebundener Tripletzustand, da die Energien mit wachsendem $\frac{1}{Z}$ größer als das Ionisierungsniveau werden.



Während, wie in Punkt I.2.2. erläutert wurde, bei den Zuständen $1s3s$ und $1s3d$ der Zustand mit dem höheren Drehimpuls im Magnetfeld energetisch tiefer liegt, bewirkt im feldfreien Fall die elektrostatische Wechselwirkung genau das Gegenteil. Wie der Verlauf der beiden Energieniveaus aussieht, wenn sowohl elektrostatische als auch magnetische Wechselwirkung vorliegen, wird im folgenden Punkt I.4.1. diskutiert und erläutert.

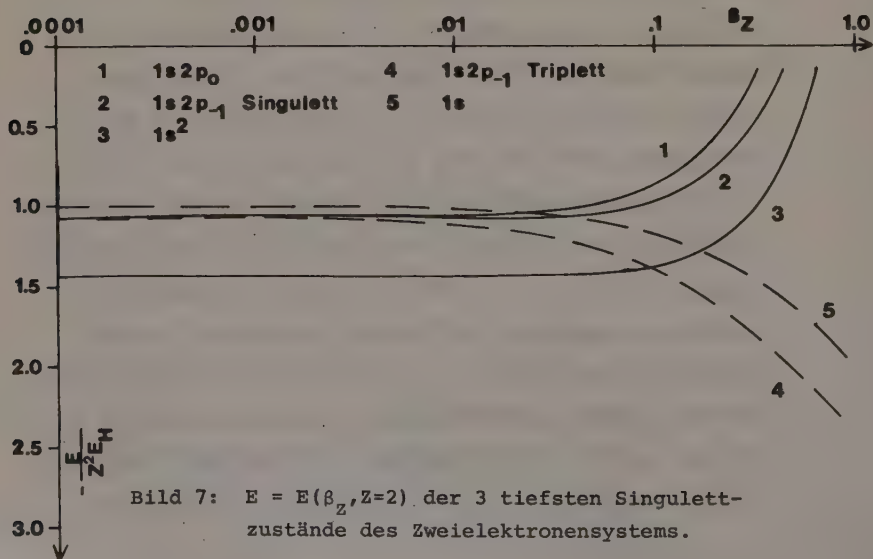
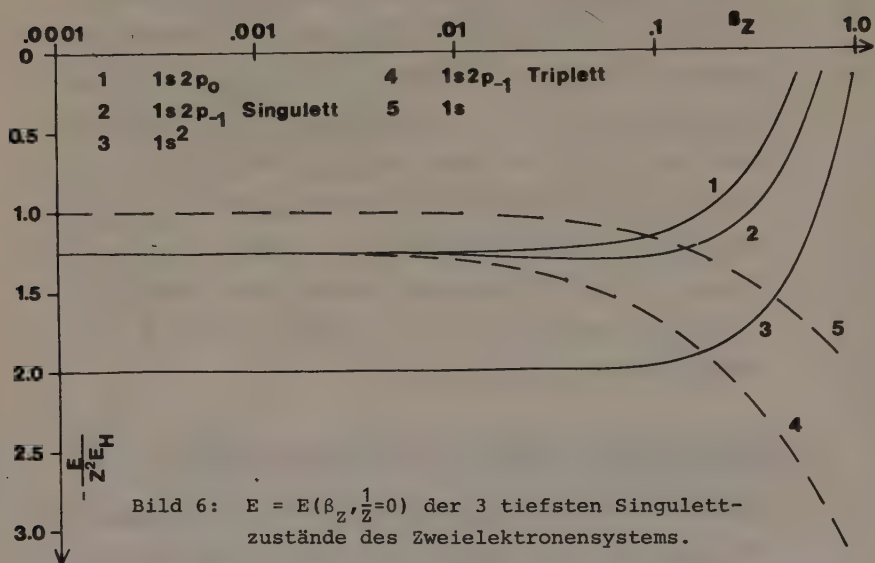
zu 2.4. Wenn beide Parameter β_Z und $\frac{1}{Z}$ von null verschieden sind, können die Zweielektronenzustände weder durch die Einelektronenzustände wie im Fall $\frac{1}{Z} = 0$, noch

durch den Gesamtdrehimpuls L wie im Fall $\beta_Z = 0$ charakterisiert werden. Die beiden guten Quantenzahlen für den allgemeinen Fall sind die Projektion des Gesamtdrehimpulses L and die Magnetfeldachse, die magnetische Quantenzahl $m = m_1 + m_2$, und die longitudinale z -Parität π , die durch die Anzahl der Knoten der Wellenfunktion des Zustandes des Zweielektronensystems festgelegt wird. Für den Fall $\beta_Z \rightarrow \infty$ und $\frac{1}{Z} = 0$ kann die z -Parität π nach der Formel $\pi = (-1)^{v_1 + v_2}$ berechnet werden, wobei durch v_1 und v_2 die Anzahl der Knoten der z -Wellenfunktion der beiden Elektronen gegeben ist.

I.3. Erläuterung der Zustände, die betrachtet werden.

Bevor wir die Zuordnungsvorschriften für den allgemeinen Fall angeben, soll zunächst untersucht werden, welche Arten von Zuständen für das Zweielektronensystem möglich sind. Wie schon einleitend bemerkt, beschränken wir uns auf Triplettzustände, da die Singulettzustände mit wachsendem Magnetfeld in das Kontinuum des nullten Landau-niveaus übergehen. In Bild 6 ist der Verlauf der Energie in Abhängigkeit von β_Z für $\frac{1}{Z} = 0$ von den tiefsten Singulettzuständen aufgetragen. Man erkennt, daß der Singulett-Grundzustand $1s^2\ ^1S$ bei $\beta_Z \sim 0.39$ im Kontinuum des nullten Landau-niveaus liegt, so daß die Singulettzustände mit wachsendem Magnetfeld an Bedeutung verlieren. In Bild 7 ist der analoge Verlauf der Energie für $Z = 2$ aufgetragen, und man erkennt, daß der tiefste Singulettzustand $1s^2\ ^1S$ bereits bei $\beta_Z \sim 0.17$ in das Kontinuum übergeht. Weiterhin sind in diese Bilder 6 und 7 der $1s2p$ Triplettzustand

und das Ionisierungs-niveau gestrichelt eingezeichnet.



Im nullten Landauniveau existieren gebundene Zustände nur für $m_i \leq 0$, da solche mit positiver, magnetischer Quantenzahl wegen der Bedingung $n_{L_i} - m_i \geq 0$ zu höheren Landauniveaus gehören.

Beim Zweielektronensystem gibt es nun grundsätzlich drei Arten von Zuständen im nullten Landauniveau.

(i) Doppelt-Tightly-Bound (DTB)

Beide Elektronen sind Tightly-Bound, d.h.

beide Elektronen werden durch Wellenfunktionen mit verschwindender Knotenzahl beschrieben

($v_1 = v_2 = 0$) und haben die magnetischen Quantenzahlen $m_1 \neq m_2$ ($m_1 \leq 0$; $m_2 \leq 0$).

(ii) Einfach-Tightly-Bound (ETB)

Ein Elektron ist Tightly-Bound, während das

zweite Elektron einen Zustand des wasserstoffähnlichen Spektrums besetzt, d.h. es gilt $v_1 = 0$,

$v_2 \neq 0$ und beide Elektronen haben beliebige magnetische Quantenzahlen m_1 und m_2 ($m_1 \leq 0$; $m_2 \leq 0$).

(iii) Höhere Zustände (KTB)

Beide Elektronen besetzen einen Zustand des wasserstoffähnlichen Spektrums, d.h. beide Elektronenzustände werden durch Wellenfunktionen mit von null verschiedener Knotenzahl beschrieben

($v_1 \neq 0$; $v_2 \neq 0$) und haben beliebige magnetische Quantenzahlen m_1 und m_2 ($m_1 \leq 0$; $m_2 \leq 0$).

Die Anzahl ND der DTB Zustände mit einem bestimmten $m = m_1 + m_2$ ist endlich und läßt sich in Abhängigkeit von m durch folgende Formel berechnen.

$$ND(m) = \left[\frac{1}{2} ((-m)+1) \right] \quad (I.6)$$

wobei ND immer eine ganze Zahl ist.

Zu jedem Wert von m gibt es eine unendliche Anzahl von ETB und KTB Zuständen.

Der DTB Zustand mit $m_1 = 0$ und beliebigem m_2 ($m_2 \neq 0$) ist für alle Werte von β_Z und $\frac{1}{Z}$ gebunden. Für $|m| \geq 3$ existieren weitere DTB Zustände, die erst mit wachsendem β_Z gebunden werden, wobei der Wert β_{ZE} , bei dem diese Zustände in das diskrete Spektrum eintauchen, von der Stärke der elektrostatischen Elektron-Elektron Wechselwirkung abhängig ist, d.h. $\beta_{ZE} = \beta_{ZE}(\frac{1}{Z})$.

Von den ETB Zuständen sind nur solche streng gebunden, deren Tightly-Bound Elektron verschwindende magnetische Quantenzahl m_1 hat. Alle anderen Zustände sind nicht wirklich gebunden, sondern führen einen strahlungslosen Autoionisierungsübergang ins Kontinuum des Tightly-Bound Zustandes mit verschwindender magnetischer Quantenzahl durch (Auger Übergang).

Alle KTB Zustände führen ebenfalls einen strahlungslosen Autoionisierungsübergang ins Kontinuum durch.

Da in dieser Arbeit keine Kontinuumszustände betrachtet werden sollen, beschränken wir unsere Untersuchungen auf die DTB Zustände und auf ETB Zustände, deren Tightly-Bound Elektron verschwindende magnetische Quantenzahl m_1 hat.

I.4. Die Zuordnungsvorschrift für den allgemeinen Fall.

Zu jedem Wert von m und π gibt es nun an beiden Enden des Magnetbereiches für jeden Wert von $Z > 1$ eine unendliche Anzahl streng gebundener Zustände. Wegen der Wignerschen Non-Crossing-Rule entsprechen sich diese Zustände in der Reihenfolge wachsender Energie. Im folgenden wollen wir nun für Zustände mit den magnetischen Quantenzahlen $m = 0, -1, -2$ und -3 die Zuordnungsvorschrift für den allgemeinen Fall erläutern und in schematischer Darstellung angeben. Zum Abschluß folgt eine kurze Erläuterung der Eigenschaften von Zuständen mit höheren Werten von $(-m)$. Das H^- -Ion mit $Z = 1$ wird im Abschnitt V.1. getrennt untersucht.

I.4.1. Die Zustände mit magnetischer Quantenzahl $m = 0$.

Hier haben beide Elektronen die magnetische Quantenzahl $m_1 = 0$: $m = m_1 = m_2 = 0$.

Für $m = 0$ existiert kein DTB Zustand. Die tiefsten Triplettzustände im feldfreien Fall ohne elektro-

statische Elektron-Elektron Wechselwirkung ($\frac{1}{Z} = 0$) sind $1s2s$ und $1s2p$, die entartet sind (vgl. I.2.1.). Schaltet man diese Wechselwirkung ein ($\frac{1}{Z} \neq 0$), so wird die Entartung aufgehoben, und man erhält als tiefsten Zustand $(1s2s)^3S \pi = +1$ und als nächst höheren den Zustand $(1s2p)^3P \pi = -1$ (vgl. I.2.3.). Dreht man nun zusätzlich das Magnetfeld auf, so ist der Gesamtdrehimpuls keine gute Quantenzahl mehr, und die Zustände werden nur noch durch die magnetische Quantenzahl m und die z -Parität π gekennzeichnet. Dies geschieht für $\beta_Z \ll 1$ durch $(1s2s)0 \pi = +1$ bzw. $(1s2p)0 \pi = -1$ und für $\beta_Z \gg 1$ durch $(00\ 02)02 \pi = +1$ bzw. $(00\ 01)01 \pi = -1$, wobei hinter der Klammer der m -Wert, $m = m_1 + m_2$, und im Fall $\beta_Z \gg 1$ auch noch die Anzahl der Knoten des Zustandes auf der z -Achse stehen. Im Fall des extrem starken Magnetfeldes hat der energetisch tiefste Zustand negative longitudinale Parität, während im feldfreien Fall der Zustand positiver longitudinaler Parität tiefer liegt. Schaltet man für $\beta_Z \gg 1$ die elektrostatische Elektron-Elektron Wechselwirkung wieder ab ($\frac{1}{Z} = 0$), so kann man die Zustände wieder durch ihre Einelektronenzustände wie folgt charakterisieren.

Der Zustand $(00\ 01)01 \pi = -1$ wird zu $00\ 01 \pi = -1$ und der Zustand $(00\ 02)02 \pi = +1$ wird zu $00\ 02 \pi = +1$.

Die Zuordnungsvorschrift für diese beiden Zustände ist in Tabelle 2 angegeben.

In Bild 8 ist die Zuordnung der Zustände für den Fall $m = 0$ und beliebiger longitudinaler Parität π schematisch dargestellt.

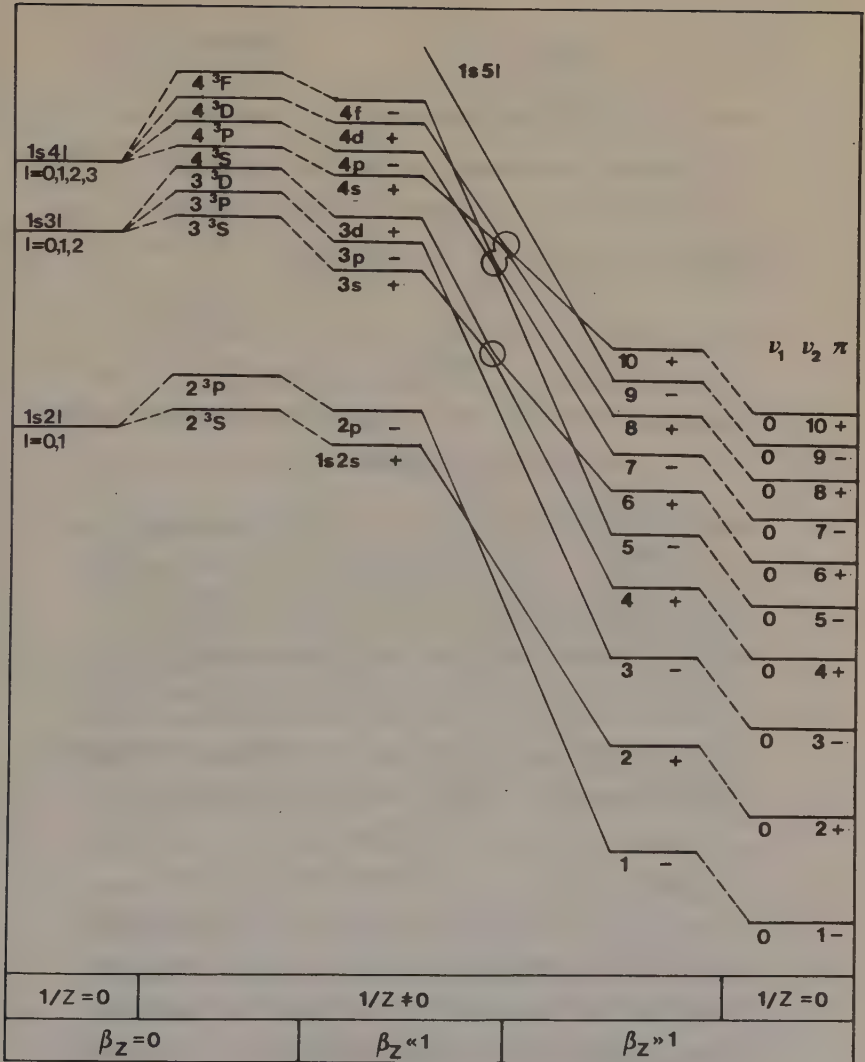


Bild 8: Zuordnung der Zustände für $m = 0$.

$$\beta_Z = 0$$

$$\beta_Z \gg 1$$

$1/Z=0$	$n_1 l_1$	$n_2 l_2$	Bezeichnung	v_1	v_2	Bezeichnung	π
	1 0	2 0	1s 2s	0	2	00 02	+1
	1 0	2 1	1s 2p	0	1	00 01	-1
$1/Z \neq 0$	$(n_1 l_1 \ n_2 l_2)$			$(v_1 \ v_2)$			
	1 0	2 0	$(1s2s)^3S$	0	2	$(00 \ 02) \ 02$	+1
	1 0	2 1	$(1s2p)^3P$	0	1	$(00 \ 01) \ 01$	-1

Tabelle 2 : Zuordnung der 2 energetisch tiefsten Zustände
mit $m=0$ für $1/Z=0$ und $1/Z \neq 0$.

Besondere Aufmerksamkeit muß den beiden Zuständen 1s3s und 1s3d mit $\pi = +1$ gewidmet werden, die im Magnetfeld und bei eingeschalteter Elektron-Elektron Wechselwirkung eine unterschiedliche Aufspaltungscharakteristik zeigen (vgl. I.2.2. und I.2.3.). Dort wurde bereits für $\frac{1}{Z} = 0$ die Zuordnung zwischen den Zuständen im feldfreien Fall und im extrem starken Magnetfeld angegeben:

$$1s3d \ \pi = +1 \qquad 00 \ 04 \ \pi = +1$$

$$1s3s \ \pi = +1 \qquad 00 \ 06 \ \pi = +1$$

Ist nun $\frac{1}{Z} \neq 0$, so sind im feldfreien Fall diese beiden Zustände nicht mehr entartet und $(1s3s)^3S$ liegt energetisch tiefer als $(1s3d)^3D$. Im Magnetfeld haben die beiden Zustände die gleichen Quantenzahlen ($m=0$ und $\pi = +1$) und dürfen sich nach der Wignerschen Non-Crossing Rule mit zunehmendem Magnetfeld nicht schneiden, sodaß folgende Zuordnung der Zustände gilt:

$$(1s3s)^3 S \pi = +1$$

$$(00\ 04)04 \pi = +1$$

$$(1s3d)^3 D \pi = +1$$

$$(00\ 06)06 \pi = +1$$

Diese Zuordnung ist gerade umgekehrt zu der im Fall $\frac{1}{Z} = 0$, so daß die Zuordnung bezüglich $\frac{1}{Z}$ nicht stetig zu sein scheint. Dieser scheinbare Widerspruch läßt sich wie folgt beseitigen.

Berechnet man den Energieverlauf der beiden Zustände durch Einkonfigurationsansätze, d.h. berücksichtigt man die Mischung der beiden Zustände über den diamagnetischen Term des Hamiltonoperators nicht, so erhält man ein Ergebnis, das der Non-Crossing Rule widerspricht; die beiden Zustände kreuzen sich. Wenn man durch einen Multikonfigurationsansatz (oder durch Diagonalisieren der beiden Zustände) die diamagnetische Wechselwirkung der beiden Zustände mit einbezieht, so erhält man das gewünschte Anticrossing der beiden Zustände, wobei sich am scheinbaren "Kreuzungspunkt", der $\frac{1}{Z}$ -abhängig ist, der Charakter der beiden Zustände ändert (Bild 9). Der tiefere Zustand, der bei kleinem Magnetfeld wegen der elektrostatischen Wechselwirkung zunächst mehr Anteile des Zustandes mit niedrigerem Drehimpuls enthält, trägt mit wachsendem Magnetfeld immer mehr den Charakter des Zustandes mit dem höheren Drehimpuls. Im Falle $\frac{1}{Z} = 0$ ist beim Einschalten des Magnetfeldes sofort der Zustand mit dem höheren Drehimpuls dominant.

In Bild 9 sind die Verläufe der Energie dieser beiden

Zustände für $\frac{1}{Z} = 0$ und $\frac{1}{2}$ in Abhängigkeit von β_Z aufgetragen. Die scheinbaren Kreuzungspunkte sind durch einen Kreis gekennzeichnet.

Die analogen Überlegungen gelten für die Zustände $1s n l$ und $1s n l'$ mit $l = l' \pm 2$ und den magnetischen Quantenzahlen $m_1 = m_2 = m = 0$. In Bild 8 sind die Bereiche des Anticrossings dieser Zustände wieder durch einen Kreis gekennzeichnet.

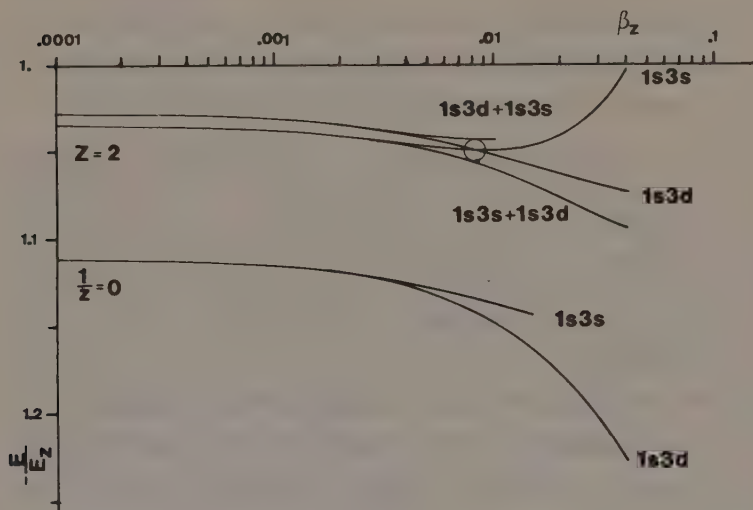


Bild 9: $E = E(\beta_Z, \frac{1}{Z})$ der Zustände $1s3s$ und $1s3d$ für $\frac{1}{Z} = 0$ und $\frac{1}{2}$.

Für den Fall $\frac{1}{Z} = 0$ und $\beta_Z \rightarrow 0$ sind die beiden Zustände $1s3s$ und $1s3d$ entartet, und man erhält für die Wellenfunktionen dieser beiden Zustände im Grenzfall $\beta_Z \rightarrow 0$ [21].

$$\Psi_{1s3s} = 0.916 \Psi_{1s3s} - 0.402 \Psi_{1s3d}$$

$$\Psi_{1s3d} = 0.402 \Psi_{1s3s} + 0.916 \Psi_{1s3d}$$

Im Fall $\frac{1}{Z} \neq 0$ wird diese Entartung durch die elektrostatische Elektron-Elektron Wechselwirkung aufgehoben, und die beiden Zustände haben im Grenzfall $\beta_Z \rightarrow 0$ die Mischungskoeffizienten 1.0 und 0.0, da die Wechselwirkung über den diamagnetischen Operator verschwindet.

I.4.2. Die Zustände mit magnetischer Quantenzahl $m = -1$.

In diesem Fall ist für die magnetischen Quantenzahlen nur die Kombination $(0; -1)$ möglich. O.B.d.A. wählen wir $m_1 = 0$ und $m_2 = -1$.

Der energetisch tiefste Zustand im extrem starken Magnetfeld besitzt die Quantenzahlen $(00-10)-10$ mit $m = -1$ und positiver longitudinaler Parität π . Dieser Zustand ist Doppelt-Tightly-Bound und gemäß Gl. (I.6) existiert für $m = -1$ kein weiterer DTB Zustand. Die Zuordnung der 4 tiefsten Zustände mit $m = -1$ ist in folgender Tabelle 3 angegeben:

$\beta_Z = 0$				$\beta_Z \gg 1$			
$1/Z=0$	$n_1 l_1$	$n_2 l_2$	Bezeichnung	$m_1 v_1$	$m_2 v_2$	Bezeichnung	π
	1 0	2 1	1s 2p	0 0	-1 0	00 -10	+1
	1 0	3 2	1s 3d	0 0	-1 1	00 -11	-1
	1 0	3 1	1s 3p	0 0	-1 2	00 -12	+1
	1 0	4 2	1s 4d	0 0	-1 3	00 -13	-1
$1/Z \neq 0$	$(n_1 l_1 \ n_2 l_2)$			$(m_1 v_1 \ m_2 v_2)$		$m \ v$	
	(1 0 2 1)		(1s2p) ³ P	(0 0 -1 0)		-1 0	+1
	(1 0 3 2)		(1s3d) ³ D	(0 0 -1 1)		-1 1	-1
	(1 0 3 1)		(1s3p) ³ P	(0 0 -1 2)		-1 2	+1
	(1 0 4 2)		(1s4d) ³ D	(0 0 -1 3)		-1 3	-1

Tabelle 3 : Zuordnung der 4 energetisch tiefsten Zustände mit $m=-1$ für $1/Z=0$ und $1/Z \neq 0$.

In Bild 10 ist die Zuordnung der Zustände für den Fall $m=-1$ und beliebiger longitudinaler Parität π schematisch dargestellt. Die Bedeutung der einzelnen Spalten und Bezeichnungen wurde bereits in Punkt I.4.1. an Hand des Falles $m=0$ genau beschrieben.

Das Problem des Auftretens eines scheinbaren Kreuzungspunktes bei Zuständen mit gleichen Quantenzahlen taucht bei $m=-1$ erstmals bei den beiden Zuständen 1s4p und 1s4f auf. Die Beseitigung dieses Widerspruchs zur Non-Crossing-Rule gelingt analog zu der in Punkt I.4.1. für die Zustände 1s3s und 1s3d beschriebenen Weise, und wir wollen auf dieses Problem hier nicht weiter eingehen.

Die beiden Zustände $1s3p_{-1}$ und $1s4f_{-1}$ haben im Magnetfeld die gleichen Quantenzahlen ($m = -1$ und $\pi = +1$), so daß sie sich wegen der Non-Crossing-Rule mit zunehmendem Magnetfeld nicht schneiden dürfen. Bei der Berechnung des Energieverlaufs dieser beiden Zustände unter Berücksichtigung ihrer diamagnetischen Wechselwirkung, erkennt man aus dem Verlauf der Mischungskoeffizienten (mit wachsendem Magnetfeld dominiert der Zustand $1s4f_{-1}$ den Zustand $1s3p_{-1}$; vgl. Bild 21), daß ein Anticrossing dieser Zustände vorliegt. Wegen des beschriebenen Anticrossings zwischen den Zuständen $1s4p_{-1}$ und $1s4f_{-1}$ wird im Fall des Zweielektronensystems der Zustand $1s4f_{-1}$ jedoch bereits vorher umgelenkt, so daß dieses weitere Anticrossing nur bei der Diskussion des Wasserstoffspektrums von Bedeutung ist, bei dem der Zustand $4f_{-1}$ beim Einschalten des Magnetfeldes sofort tiefer als $4p_{-1}$ liegt.

I.4.3. Die Zustände mit magnetischer Quantenzahl $m = -2$.

Die magnetische Quantenzahl $m = -2$ kann durch die beiden Kombinationen $(0; -2)$ und $(-1; -1)$ der magnetischen Quantenzahlen m_1 der Eielektronenzustände gebildet werden. Die Kombination $(m_1; m_2) = (-1; -1)$ wird außer Betracht gelassen, da hiermit kein DTB Zustand gebildet werden kann, und deshalb zusammen mit den Eigenschaften der ETB Zustände kein streng gebundener Zustand vorliegt. O.B.d.A. wählen wir wieder $m_1 = 0$ und $m_2 = -2$. Der energetisch tiefste Zustand im extrem starken Magnetfeld besitzt die Quantenzahlen $(00 -20) -2 0$ mit positiver longitudinaler Parität π . Dieser Zustand

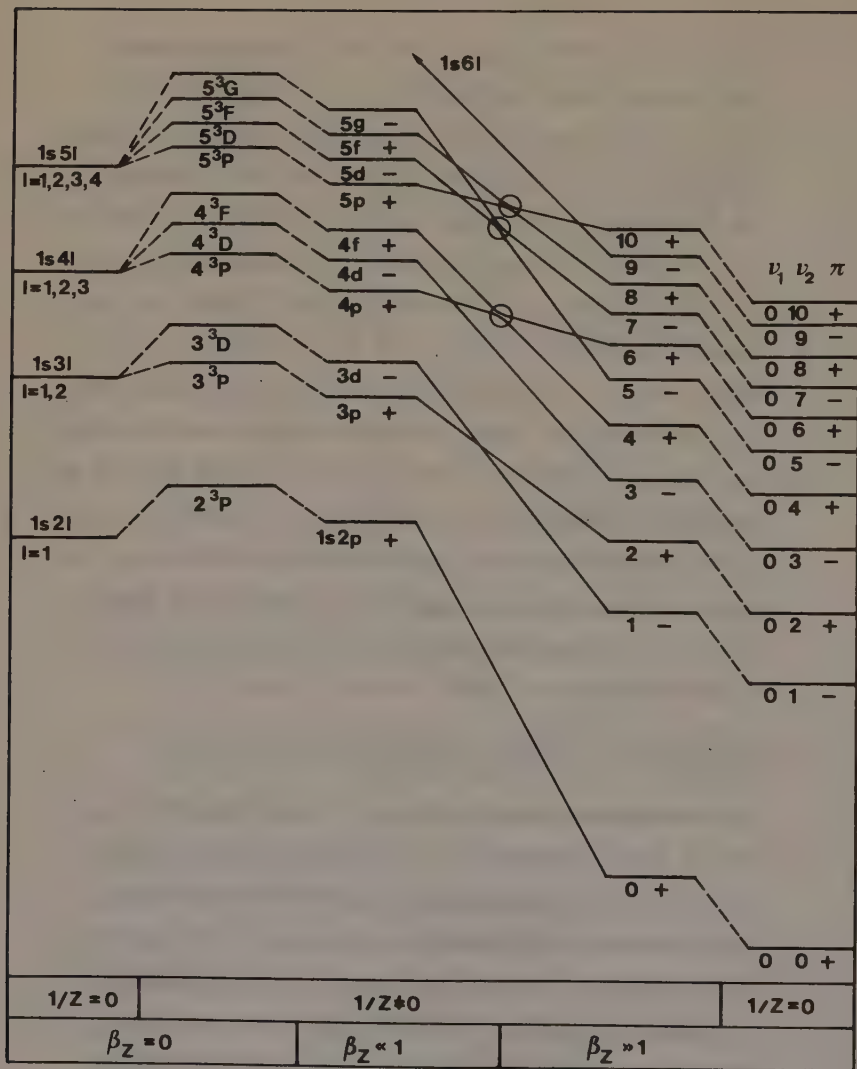


Bild 10: Zuordnung der Zustände für $m = -1$.

ist DTB und gemäß Gl. (I.6) existiert für $m = -2$ kein weiterer DTB Zustand $(ND(-2) = \left[\frac{1}{2}((+2)+1) \right] = \left[\frac{3}{2} \right] = 1)$. Die Zuordnung der 4 tiefsten Zustände mit $m = -2$ ist in Tabelle 4 angegeben.

$\beta_Z = 0$				$\beta_Z \gg 1$			
$1/Z=0$	$n_1 l_1$	$n_2 l_2$	Bezeichnung	$m_1 v_1$	$m_2 v_2$	Bezeichnung	π
	1 0	3 2	1s 3d	0 0	-2 0	00 -20	+1
	1 0	4 3	1s 4f	0 0	-2 1	00 -21	-1
	1 0	4 2	1s 4d	0 0	-2 2	00 -22	+1
	1 0	5 3	1s 5f	0 0	-2 3	00 -23	-1
$1/Z \neq 0$	$(n_1 l_1 \ n_2 l_2)$			$(m_1 v_1 \ m_2 v_2)$		$m \ v$	
	(1 0 3 2)	(1s3d) ³ D		(0 0 -2 0)		-2 0	+1
	(1 0 4 3)	(1s4f) ³ F		(0 0 -2 1)		-2 1	-1
	(1 0 4 2)	(1s4d) ³ D		(0 0 -2 2)		-2 2	+1
	(1 0 5 3)	(1s5f) ³ F		(0 0 -2 3)		-2 3	-1

Tabelle 4 : Zuordnung der 4 energetisch tiefsten Zustände mit $m = -2$ für $1/Z = 0$ und $1/Z \neq 0$.

In Bild 11 ist die Zuordnung der Zustände für diesen Fall schematisch dargestellt. Die Bedeutung der einzelnen Spalten und Bezeichnungen ist wieder analog dem Fall $m = 0$, der in Punkt I.4.1. (Bild 8) genau beschrieben wurde.

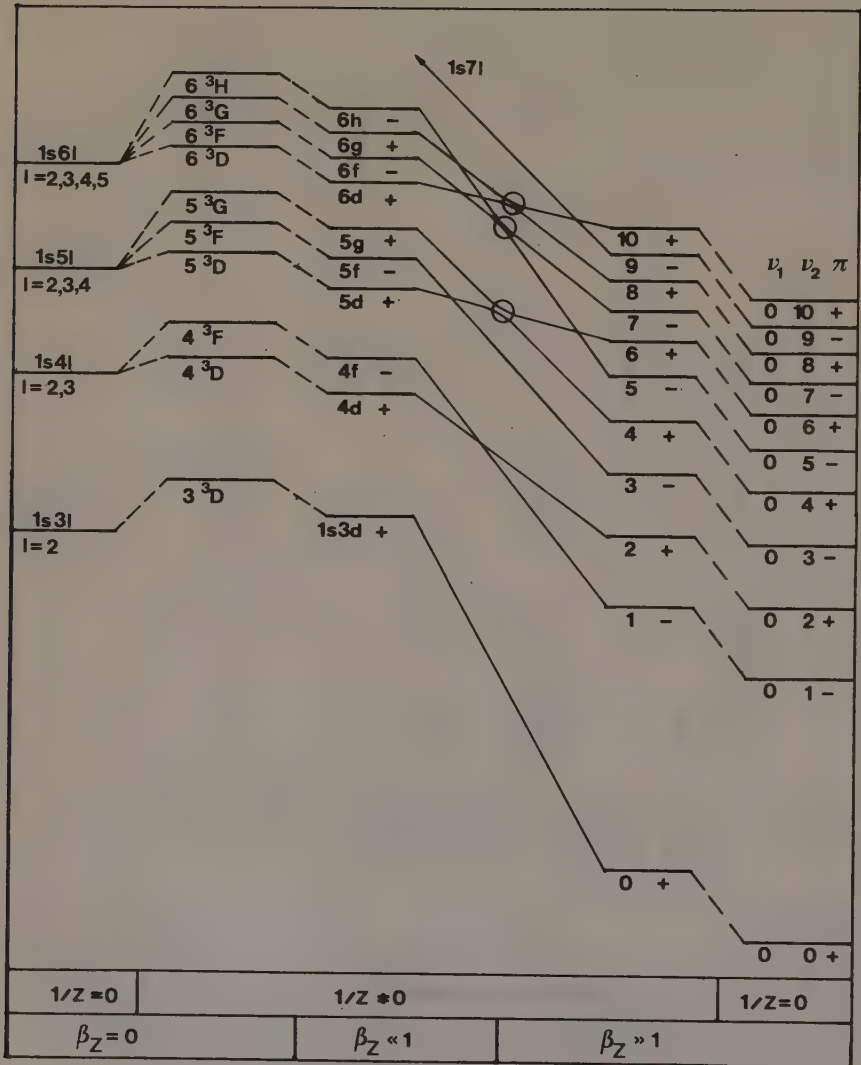


Bild 11: Zuordnung der Zustände für $m = -2$.

Das Problem des Auftretens eines scheinbaren Kreuzungspunktes bei Zuständen mit gleichen Quantenzahlen taucht bei $m = -1$ erstmals bei den Zuständen $1s5d$ und $1s5g$ auf. Die Beseitigung dieses Widerspruchs zur Non-Crossing-Rule gelingt analog zu der in Punkt I.4.1. für die Zustände $1s3s$ und $1s3d$ beschriebenen Weise, und wir wollen auf dieses Problem hier nicht weiter eingehen.

I.4.4. Die Zustände mit magnetischer Quantenzahl $m = -3$.

Die magnetische Quantenzahl $m = -3$ kann durch die beiden Kombinationen $(0; -3)$ und $(-1; -2)$ der magnetischen Quantenzahlen m_i der Eielektronenzustände gebildet werden. Die Anzahl ND der DTB Zustände berechnet man nach Gl. (I.6) zu $ND(-3) = \left[\frac{1}{2}(3+1) \right] = 2$. Mit beiden Kombinationen der magnetischen Quantenzahlen kann je ein DTB Zustand gebildet werden, die im extrem starken Magnetfeld durch folgende Quantenzahlen charakterisiert werden:

$$(i) \quad (m_1; m_2) = (0; -3)$$

$$(00; -30) \quad m = -3 \quad v = 0 \quad \pi = +1$$

$$(ii) \quad (m_1; m_2) = (-1; -2)$$

$$(-10; -20) \quad m = -3 \quad v = 0 \quad \pi = +1$$

Im Gegensatz zu den niedrigeren $|m|$ -Werten, bei denen maximal ein DTB Zustand existiert, gelingt die Zuordnung durch Besetzung der Einelektronenfunktionen gemäß der vom Wasserstoff bekannten Vorschrift [12] nur bei abgeschalteter elektrostatischer Elektron-Elektron Wechselwirkung ($\frac{1}{Z} = 0$). Die Zuordnung einiger Zustände mit $m = -3$ findet man in Tabelle 1, die bereits dort für den Fall $\frac{1}{Z} = 0$ diskutiert wurde. Schaltet man die elektrostatische Elektron-Elektron Wechselwirkung ein ($\frac{1}{Z} \neq 0$), so können die in Kapitel I.4.2. erwähnten Zustände $(1s5f)^3F$ bzw. $(00 -32) \quad m = -3 \quad \pi = +1$ und $(2p3d)^3F$ bzw. $(-10, -20) \quad m = -3 \quad \pi = +1$ durch ihre Einelektronenzustände nicht mehr unterschieden werden, und sie dürfen sich wegen der Non-Crossing-Rule nicht kreuzen. Die Zuordnung von 4 Zuständen mit $m = -3$ und positiver longitudinaler Parität, die sich hieraus ergibt, ist in Tabelle 5 für $\frac{1}{Z} = 0$ und $\frac{1}{Z} \neq 0$ angegeben.

Mit zunehmendem Magnetfeld wird der Zustand $-10 -20$ energetisch immer tiefer (Intruder) und schneidet im Fall $\frac{1}{Z} = 0$ alle Zustände $00 -3v$ mit positiver longitudinaler Parität ($v \neq 0$ und gerade), bis er schließlich dem DTB Zustand $00 -30$ energetisch benachbart ist. Im Fall $\frac{1}{Z} \neq 0$ dürfen sich diese Zustände nicht schneiden, und es tritt an den entsprechenden Punkten jeweils Anticrossing auf.

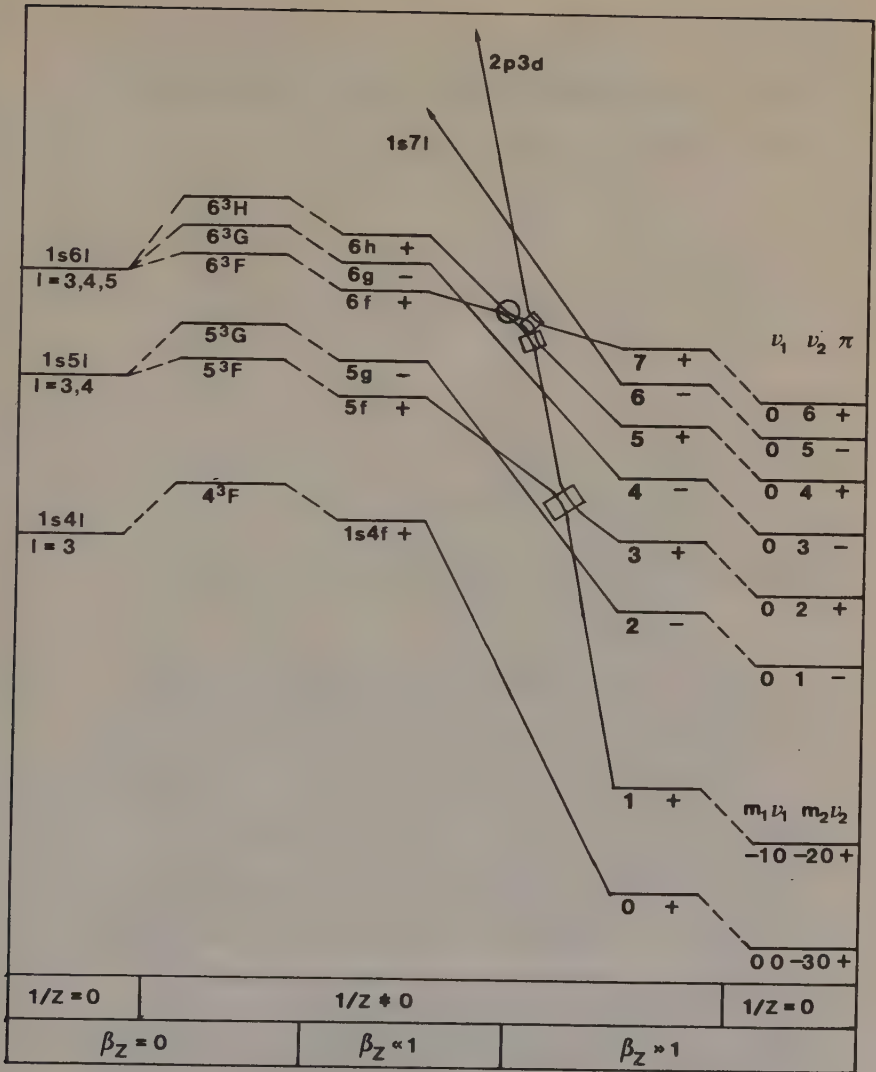


Bild 12: Zuordnung der Zustände für $m = -3$.

$\beta_Z=0$				$\beta_Z>>1$			
$1/Z=0$	$n_1 l_1$	$n_2 l_2$	Bezeichnung	$m_1 v_1$	$m_2 v_2$	Bezeichnung	π
	1 0	4 3	1s 4f	0 0	-3 0	00 -30	+1
	1 0	5 3	1s 5f	0 0	-3 2	00 -32	+1
	1 0	6 3	1s 6f	0 0	-3 4	00 -34	+1
	2 1	3 2	2p 3d	-1 0	-2 0	-10 -20	+1
$1/Z \neq 0$	$(n_1 l_1$	$n_2 l_2)$		$(m_1 v_1$	$m_2 v_2)$	m	v
	(1 0	4 3)	(1s4f) ³ F	(0 0	-3 0)	-3 0	+1
	(1 0	5 3)	(1s5f) ³ F	(-1 0	-2 0)	-3 0	+1
	(1 0	6 3)	(1s6f) ³ F	(0 0	-3 2)	-3 2	+1
	(1 0	6 5)	(1s6h) ³ H	(0 0	-3 4)	-3 4	+1

Tabelle 5 : Zuordnung von Zuständen mit $m=-3$ und $\pi=+1$
für $1/Z=0$ und $1/Z \neq 0$.

In Bild 12 ist die Zuordnung der Zustände für diesen Fall schematisch dargestellt. Die Bereiche des Anticrossings zwischen dem Intruder 2p3d bzw. -10 -20, der im extrem starken Magnetfeld DTB ist, und den anderen Zuständen positiver longitudinaler Parität sind in diesem Bild 12 durch Rechtecke gekennzeichnet. Die Bedeutung der einzelnen Spalten und sonstigen Bezeichnungen ist wieder analog dem Fall $m=0$, der in Punkt I.4.1.

(bzw. Bild 8) genau beschrieben wurde.

Das Problem des Auftretens eines scheinbaren Kreuzungspunktes, das bereits bei den Zuständen mit magnetischer Quantenzahl $(-m) \leq 2$ vorlag, taucht bei $m=-3$ erstmals bei den Zuständen 1s6f und 1s6h auf. Die Beseitigung

dieses Widerspruchs zur Non-Crossing-Rule gelingt analog zu der in Punkt I.4.1. für die Zustände $1s3s$ und $1s3d$ beschriebenen Weise, und wir wollen auf dieses Problem an dieser Stelle nicht weiter eingehen.

I.4.5. Die Zustände mit höherer magnetischer Quantenzahl ($|m| > 3$).

Die Anzahl der DTB Zustände für eine bestimmte magnetische Quantenzahl m ist nach Gl. (I.6) gegeben durch $\left[\frac{1}{2}((-m)+1) \right]$, d.h. mit zunehmendem $(-m)$ erhöht sich auch die Anzahl der DTB Zustände und somit die Anzahl der Intruders, die analog zu dem in Punkt I.2.4.4. beschriebenen Zustand $-10 -20$ energetisch immer tiefer werden und im Fall $\frac{1}{2} = 0$ die Zustände $00 m_v$ ($v \neq 0$ gerade) schneiden. Im Fall $\frac{1}{2} \neq 0$ dürfen sich diese Zustände wegen der Wignerschen Non-Crossing-Rule nicht schneiden, und es tritt wieder Anticrossing auf.

In der Tabelle 6 ist für $m = -5$, bei dem 3 DTB Zustände existieren, die Zuordnung einiger Zustände positiver longitudinaler Parität $\pi = +1$ für $\frac{1}{2} = 0$ und $\frac{1}{2} \neq 0$ angegeben.

Die analogen Zuordnungsvorschriften gelten jedoch nicht mehr für Zustände mit genügend hohen magnetischen Quantenzahlen $|m|$, bei denen die DTB Zustände in das wasserstoffähnliche Spektrum hineinwandern. Eine Untersuchung, für welche m -Werte dieser Fall eintritt, wurde für das

wasserstoffähnliche System von W. Rösner et al. [11] durchgeführt. Diese Ergebnisse sind auf das Zweielektronensystem für den Fall $\frac{1}{Z} = 0$ übertragbar.

$\beta_Z = 0$				$\beta_Z \gg 1$			
$1/Z=0$	$n_1 l_1$	$n_2 l_2$	Bezeichnung	$m_1 v_1$	$m_2 v_2$	Bezeichnung	π
	1 0	6 5	1s 6h	0 0	-5 0	00 -50	+1
	1 0	7 5	1s 7h	0 0	-5 2	00 -52	+1
	1 0	8 5	1s 8h	0 0	-5 4	00 -54	+1
	1 0	8 7	1s 8j	0 0	-5 6	00 -56	+1
	2 1	5 4	2p 5g	-1 0	-4 0	-10 -40	+1
	3 2	4 3	3d 4f	-2 0	-3 0	-20 -30	+1
$1/Z \neq 0$	$(n_1 l_1 \ n_2 l_2)$			$(m_1 v_1 \ m_2 v_2)$		$m \ v$	
	(1 0 6 5)		(1s6h) ³ H	(0 0 -5 0)		-5 0	+1
	(1 0 7 5)		(1s7h) ³ H	(-1 0 -4 0)		-5 0	+1
	(1 0 8 5)		(1s8h) ³ H	(-2 0 -3 0)		-5 0	+1
	(1 0 8 7)		(1s8j) ³ J	(0 0 -5 2)		-5 2	+1

Tabelle 6 : Zuordnung von Zuständen mit $m=-5$ und $\pi=+1$ für $1/Z=0$ und $1/Z \neq 0$.

II. Die Hartree-Fock Methode bei Anwendung auf Ionen und Atome im äußeren Magnetfeld.

In diesem Abschnitt soll die Methode erläutert werden, die es ermöglicht, die Bindungsenergien von Mehrelektronensystemen im Magnetfeld für Feldstärken mit $\beta_Z = 0$ bis zu $\beta_Z \approx 1$ zu berechnen.

II.1. Der Hamiltonoperator mit äußerem Magnetfeld.

Der nichtrelativistische Hamiltonoperator für ein Atom mit N Elektronen, der Kernladungszahl Z und unendlich schwerem Kern im äußeren Magnetfeld $\underline{B}$, beschrieben durch das Vektorpotential $\underline{A}$, lautet:

$$H = \frac{1}{2m_e} \sum_{i=1}^N \left[\underline{p}_i + e \underline{A}(\underline{r}_i) \right]^2 - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\underline{r}_i - \underline{r}_j|} \quad (\text{II.1})$$

Das äußere B-Feld sei homogen in z-Richtung: $\underline{B} = (0, 0, B)$.

Für das Vektorpotential wählen wir: $\underline{A} = (\underline{B} \times \underline{r})/2 = \frac{1}{2} B (-y, x, 0)$.

Hieraus folgt:

$$H = \frac{1}{2m_e} \sum_{i=1}^N \underline{p}_i^2 - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \frac{eB}{2m_e} \sum_{i=1}^N (x_i p_{y_i} - y_i p_{x_i}) + \frac{e^2 B^2}{8m_e} \sum_{i=1}^N (x_i^2 + y_i^2) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\underline{r}_i - \underline{r}_j|} \quad (\text{II.2})$$

Mit $x_i p_{y_i} - y_i p_{x_i} = l_{z_i} \hbar$ und $\sum_{i=1}^N l_{z_i} = L_z$

$x_i^2 + y_i^2 = r_i^2 \sin^2 \theta_i$ gilt:

$$H = \frac{1}{2m_e} \sum_{i=1}^N p_i^2 - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \frac{e\hbar}{2m_e} B L_z + \frac{e^2 B^2}{8m_e} \sum_{i=1}^N r_i^2 \sin^2 \theta_i +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\underline{r}_i - \underline{r}_j|}$$

Wir wollen nun den Hamiltonoperator für unsere Rechnungen wie folgt umschreiben:

Die Energie wird in atomaren Einheiten a.u. gemessen.

$$1 \text{ a.u.} = m_e c^2 \alpha^2 = 219474.6 \text{ cm}^{-1} = 27.21 \text{ eV} = 2E_H$$

Die Längen werden in Einheiten des Bohrschen Atomradius r_B gemessen.

$$r_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.528 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Das Magnetfeld B drücken wir durch die Größe β gemäß Gl. (I.1.) aus.

Fügt man noch den Spinanteil $H_{Sp} = 2\mu_B S_z$ hinzu, so erhält man folgenden Ausdruck für den Hamiltonoperator:

$$H = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} + \frac{1}{2} \beta^2 r_i^2 \sin^2 \theta_i \right] + \beta (L_z + 2S_z) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (\text{II.3})$$

mit $r_{ij} = |\underline{r}_i - \underline{r}_j|$ und $r_i = |\underline{r}_i|$

II.2. Konstruktion der Wellenfunktionen des Hamiltonoperators.

Die N-Teilchenwellenfunktionen werden in Form von Slaterdeterminanten angegeben, die aus Produkten von Einteilchenwellenfunktionen aufgebaut werden.

Die Einteilchenfunktionen besitzen folgende Form:

$$u_{nlm m_s}(r, \theta, \phi, s) = \frac{1}{r^2} p_{nlm}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \chi_{1/2 m_s} \quad (\text{II.4})$$

Mit der Forderung

$$\int_0^\infty p_{nlm}(r) p_{n'l'm'}(r) dr = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (\text{II.4a})$$

bilden die Einteilchenwellenfunktionen ein orthonormales Funktionensystem, das zur Konstruktion von N-Teilchenwellenfunktionen benutzt werden kann.

Die N-Teilchenfunktionen werden aus Slaterdeterminanten (SD) konstruiert.

$$\phi_{\alpha M_L M_S} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_1(1) & \dots & u_1(N) \\ \vdots & & \vdots \\ u_N(1) & \dots & u_N(N) \end{vmatrix} \quad (\text{II.5})$$

Es gilt:

- $u_i(j) := u_{n_i l_i m_i m_{s_i}}(r_j \theta_j \phi_j s_j)$
- SD sind total antisymmetrisch gegenüber Teilchen- oder Koordinatenvertauschungen
- SD besitzen die Parität $P = (-1)^{\sum_{i=1}^N l_i}$ und

- die Quantenzahlen

$$M_L = \sum_{i=1}^N m_i \quad \text{und} \quad M_S = \sum_{i=1}^N m_{s_i}$$

- die Konfiguration einer SD ist die Liste der (nlm)-Werte $(n_1 l_1 m_1)^{N_1}, (n_2 l_2 m_2)^{N_2} \dots$

$$\text{mit } N_1 + N_2 \dots = N$$

Beim Einschalten eines äußeren Magnetfeldes ist der Gesamtdrehimpuls keine gute Quantenzahl mehr. Die Zustände müssen nach den Quantenzahlen S, M_L und M_S bestimmt werden. Im allgemeinen enthält eine SD einer Funktion Anteile zu verschiedenem Spin S . Deshalb ist die Gesamtwellenfunktion eines Zustandes eine Linearkombination von SD mit definierten M_L und M_S -Quantenzahlen.

$$\psi_{SM_L M_S} = \sum_{\alpha} c_{S, \alpha}^{M_S} \phi_{\alpha M_L M_S} \quad (\text{II.6})$$

wobei der Index α die verschiedenen Möglichkeiten angibt, innerhalb einer Konfiguration die Quantenzahl M_S zu bilden. Die Berechnung der Koeffizienten $c_{S, \alpha}^{M_S}$ kann mit Hilfe der Projektionsmethode erfolgen und ist im Anhang zu finden.

Ist bei einer SD die M_S -Quantenzahl maximal, so besteht die Gesamtwellenfunktion $\psi_{SM_L M_S}$ aus genau dieser SD.

$$\psi_{SM_L M_S} = \phi_{M_L M_S} \quad \text{wobei } S = |M_S| \quad \text{gilt.} \quad (\text{II.7})$$

Konfigurationsmischungen

Zwischen Wellenfunktionen zu verschiedenen Konfigurationen kann es nichtverschwindende Matrixelemente des Operators (II.3) geben. Der allgemeinste Ansatz für Wellenfunktionen des Hamiltonoperators (II.3) ist deshalb eine Linearkombination von Wellenfunktionen

$\psi_{\gamma S M_L M_S}$, wobei γ die zugehörige Konfiguration kennzeichnet.

$$\Psi_{S M_L M_S} = \sum_{\gamma} c_{\gamma} \psi_{\gamma S M_L M_S} \quad (\text{II.8})$$

II.3. Matrixelemente des Hamiltonoperators.

Die Gesamtenergie E_{tot} eines N-Elektronensystems setzt sich zusammen aus Einteilchenmatrixelementen und Zweiteilchenmatrixelementen, entsprechend dem Aufbau des Hamiltonoperators (II.3) aus Einteilchen- und Zweiteilchenoperatoren.

$$H = \sum_{i=1}^N f_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N g_{ij} \quad (\text{II.9})$$

Mit den Abkürzungen

$$f_i = -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} + \beta (1_{z_i} + 2s_{z_i}) + \frac{1}{2} \beta^2 r_i^2 \sin^2 \theta_i \quad (\text{II.10})$$

$$g_{ij} = \frac{1}{2r_{ij}} \quad (\text{II.11})$$

Einteilchenmatrixelemente

Der in β lineare Anteil des Operators $\sum_i f_i$ liefert zur Energie E_{tot} den Beitrag $\beta(M_L + 2M_S)$ [Paramagnetismus]. Der in β quadratische Anteil liefert folgende Einteilchenmatrixelemente [Diamagnetismus]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \langle nlm | r^2 \sin^2 \theta | n' l' m' \rangle &= \frac{1}{3} \langle nlm | r^2 [C_0^{(0)} - C_0^{(2)}] | n' l' m' \rangle = \\ &= \frac{1}{3} \delta_{mm', \sigma_R} (nlm, n' l' m') \{ \delta_{ll'} - C^2(lm, l' m) \} \end{aligned} \quad (\text{II.12})$$

Es gilt die Auswahlregel $|l - l'| \leq 2 \leq l + l'$

Das Radialintegral σ_R lautet:

$$\sigma_R(nlm, n' l' m) = \int_0^\infty P_{nlm}(r) P_{n' l' m}(r) r^2 dr \quad (\text{II.13})$$

Eine Tabelle der Koeffizienten $c^2(lml' m')$ ist im Anhang zu finden.

Der von β unabhängige Anteil des Einteilchenoperators liefert Einteilchenmatrixelemente der Form:

$$I(nlm, n' l' m') = -\delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta_{m_S m'_S} \frac{1}{2} \int_0^\infty P_{nlm}(r) L P_{n' l' m}(r) dr \quad (\text{II.14})$$

mit der Abkürzung

$$L = \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2Z}{r} - \frac{1(l+1)}{r^2} \right] \quad (\text{II.15})$$

Einteilchenmatrixelemente treten nur zwischen identischen SD auf oder zwischen SD, die sich in genau einem Teilchen unterscheiden.

Zweiteilchenmatrixelemente

Der Operator der elektrostatischen Wechselwirkung g_{ij} (II.12) ist ein Zweiteilchenoperator. Die damit gebildeten Zweiteilchenmatrixelemente besitzen folgende Form:

$$\langle AB | \frac{1}{r_{12}} | CD \rangle = \int \int u_A(1) u_B(2) \frac{1}{r_{12}} u_C(1) u_D(2) d\tau_1 d\tau_2 \quad (\text{II.16})$$

Die Größe A steht für die Menge der Quantenzahlen $n_A l_A m_A m_{s_A}$, und $u_A(1)$ ist die Wellenfunktion, die das Teilchen 1 beschreibt.

Zur expliziten Berechnung des Zweiteilchenmatrixelementes wird der Operator $\frac{1}{r_{12}}$ nach Kugelflächenfunktionen entwickelt.

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{k=0}^{\infty} U_k(r_1, r_2) \underline{C}^{(k)}(1) \cdot \underline{C}^{(k)}(2) \quad (\text{II.17})$$

mit

$$U_k(r_1, r_2) = \begin{cases} \frac{r_1^k}{r_2^{k+1}} & r_1 < r_2 \\ \frac{r_2^k}{r_1^{k+1}} & r_1 > r_2 \end{cases} \quad (\text{II.18})$$

Die Komponenten des Tensors 2. Stufe $\underline{C}^{(k)}(i)$ sind wie folgt definiert:

$$C_{kq}(i) = \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} Y_{kq}(\theta_i, \phi_i) \quad (\text{II.19})$$

Bei dieser Wahl spaltet sich das Integral (II.16) auf in einen Winkelanteil (explizite Berechnung ist im nächsten Abschnitt zu finden) und einen Radialanteil R^k , wobei die Summation über k von $\max(|l_1 - l_3|, |l_2 - l_4|)$ bis $\min(l_1 + l_3, l_2 + l_4)$ zu erstrecken ist.

$$R^k(n_1 l_1 m_1, n_2 l_2 m_2; n_3 l_3 m_3; n_4 l_4 m_4) = \int_0^\infty \int_0^\infty P_1(r_1) P_2(r_2) \frac{r^k}{r^{k+1}} P_3(r_1) P_4(r_2) dr_1 dr_2 \quad (\text{II.20})$$

Das Radialintegral wird im nächsten Abschnitt durch $R^k(12,34)$ abgekürzt.

Die Winkelabhängigkeit der Zweiteilchenmatrixelemente.

Der von k abhängige Winkelanteil des Integrals (II.16) läßt sich nach folgender Gleichung berechnen:

$$\langle 12 | C_{kq}(1) C_{kq}(2) | 34 \rangle = \delta_{m_{s_1} m_{s_3}} \delta_{m_{s_2} m_{s_4}} \delta_{(m_1+m_2)(m_3+m_4)} * c^k(l_1 m_1 l_3 m_3) c^k(l_4 m_4 l_2 m_2) R^k(12,34) \quad (\text{II.21})$$

Für die Koeffizienten $c^k(l_i m_i l_j m_j)$ findet man folgende Formel:

$$c^k(l_i m_i l_j m_j) = (-1)^{m_i} \sqrt{(2l_i+1)(2l_j+1)} \begin{pmatrix} l_i & l_j & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_i & l_j & k \\ -m_i & m_j & m_i - m_j \end{pmatrix} \quad (\text{II.22})$$

Matrizelemente zwischen Slaterdeterminanten.

1. Die Slaterdeterminanten sind identisch.

Sei $\Phi_{\alpha M_L M_S}$ eine SD des N-Teilchensystems:

$$\Phi_{\alpha M_L M_S} = \begin{vmatrix} n_1 l_1 m_1 & m_{s_1} \\ n_2 l_2 m_2 & m_{s_2} \\ \vdots & \vdots \\ n_N l_N m_N & m_{s_N} \end{vmatrix} \quad \begin{aligned} M_L &= m_1 + m_2 + \dots + m_N \\ M_S &= m_{s_1} + m_{s_2} + \dots + m_{s_N} \end{aligned} \quad (\text{II.23})$$

Es gilt für den Zweiteilchenoperator $\frac{1}{r_{12}}$:

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \frac{1}{2r_{12}} | \Phi \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \{ \sum_k a^k(l_i m_i l_j m_j) F^k(i, j) - \\ &\quad - \delta_{m_{s_i} m_{s_j}} \sum_k b^k(l_i m_i l_j m_j) G^k(i, j) \} \end{aligned} \quad (\text{II.24})$$

mit den Abkürzungen:

$$a^k(l_i m_i l_j m_j) = c^k(l_i m_i l_i m_i) c^k(l_j m_j l_j m_j) \quad (\text{II.25})$$

$$b^k(l_i m_i l_j m_j) = [c^k(l_i m_i l_j m_j)]^2 \quad (\text{II.26})$$

$$F^k(i, j) = R^k(i, j, i, j) \quad (\text{II.27})$$

$$G^k(i, j) = R^k(i, j, j, i) \quad (\text{II.28})$$

Für die Summe der Einteilchenoperatoren gilt:

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \sum_{i=1}^N f_i | \Phi \rangle &= \sum_{i=1}^N I(n_i l_i m_i, n_i l_i m_i) + \beta (M_L + 2M_S) + \\ &+ \frac{1}{3} \sum_{i=1}^N \beta^2 (1 - c^2(l_i m_i l_i m_i)) \sigma_R(n_i l_i m_i, n_i l_i m_i) \end{aligned} \quad (II.29)$$

2. Die Slaterdeterminanten unterscheiden sich in einem Teilchen.

Seien Φ_1 und Φ_2 zwei SD des N-Teilchensystems, die sich in den Teilchen N und N' unterscheiden.

$$\Phi_1 = \begin{vmatrix} n_1 l_1 m_1 m_{s_1} & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ n_{N-1} l_{N-1} m_{N-1} m_{s_{N-1}} & . & . & . & . \\ n_N l_N m_N m_{s_N} & . & . & . & . \end{vmatrix} \quad \Phi_2 = \begin{vmatrix} n_1 l_1 m_1 m_{s_1} & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ n_{N-1} l_{N-1} m_{N-1} m_{s_{N-1}} & . & . & . & . \\ n'_N l'_N m'_N m'_{s_N} & . & . & . & . \end{vmatrix} \quad \begin{matrix} M_L = M'_L \text{ und} \\ M_S = M'_S \end{matrix} \quad (II.30)$$

Für den Zweiteilchenoperator $\frac{1}{r_{12}}$ gilt:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_1 | \frac{1}{2r_{12}} | \Phi_2 \rangle &= \sum_{i=1}^{N-1} \left[\langle iN | \frac{1}{2r_{12}} | iN' \rangle - \langle iN | \frac{1}{2r_{12}} | N' i \rangle \right] = \\ &= \delta_{m_N m_{N'}} \delta_{m_{s_N} m_{s_{N'}}} \sum_{i=1}^{N-1} \left[\sum_k c^k(l_i m_i l_i m_i) c^k(l_{N'} m_{N'} l_N m_N) R^k(iN iN') - \right. \\ &\quad \left. - c^k(l_i m_i l_{N'} m_{N'}) c^k(l_i m_i l_N m_N) R^k(iN N' i) \right] \end{aligned} \quad (II.31)$$

Für den Einteilchenoperator gilt:

$$\langle \Phi_1 | \sum_{i=1}^N f_i | \Phi_2 \rangle = \langle N | f_N | N' \rangle \prod_{i=1}^{N-1} \langle i | i \rangle \quad (\text{II.32})$$

(i) magnetische Wechselwirkung:

$$\langle N | f_{m_N} | N' \rangle = \frac{1}{3} \beta^2 \sigma_R (NN') [\delta_{1_N 1_N'} - c^2 (1_N m_N 1_N' m_N')] \quad (\text{II.33})$$

(ii) für $1_N = 1_{N'}$, treten noch Matricelemente mit dem Operator der kinetischen Energie auf [14].

Ein in β lineares Glied tritt zwischen Slaterdeterminanten, die sich in einem Teilchen unterscheiden nicht auf.

3. Die Slaterdeterminanten unterscheiden sich in zwei Teilchen.

Hier tauchen nur Matricelemente des elektrostatischen Operators auf. Seien die Teilchen 1 bis N-2 identisch, und die SD unterscheiden sich in den Teilchen N-1, N bzw. (N-1)' N'.

$$\begin{aligned} \langle \Phi_1 | \frac{1}{2r_{12}} | \Phi_2 \rangle &= \frac{1}{2} \delta_{m_{N-1} m_{N-1}'} \delta_{m_N m_N'} \sum_k c^k (1_{N-1} m_{N-1} 1_{N-1}' m_{N-1}') * \\ &\quad c^k (1_N' m_N' 1_N m_N) * R^k (N-1, N, (N-1)', N') \\ &= \delta_{m_{N-1} m_{N-1}'} \delta_{m_N m_N'} \sum_k c^k (1_{N-1} m_{N-1} 1_N' m_N') c^k (1_N' m_N' 1_N m_N) * \\ &\quad R^k (N-1, N, N', (N-1)') \end{aligned} \quad (\text{II.34})$$

Hierbei wird vorausgesetzt, daß die SD gleiches Gesamt- M_L besitzen.

II.4. Die Hartree-Fock-Gleichungen:

Die Lösung ψ der stationären Schrödingergleichung

$$H\psi = E\psi \quad (II.35)$$

gewinnt man durch Lösen des Variationsproblems

$$\delta \left[\int \psi^* H \psi d\tau + \lambda \int \psi^* \psi d\tau \right] = 0 \quad (II.36)$$

Mit dem Ansatz (II.4), (II.5) kann die Winkelintegration des Problems exakt analytisch durchgeführt werden. Die zu variierenden Größen sind die Radialfunktionen $P_{nlm}(r)$. Zur Ausführung der Variation muß die Gesamtenergie E_{tot} berechnet werden. Mit Kenntnis von E_{tot} und unter Verwendung der Orthonormalitätsrelation (II.4a) der Einteilchenfunktionen u_i (II.4) erhält man die folgende Gleichung:

$$\delta E_{tot} + \sum_{i,j=1}^N \lambda_{ij} \delta \int u_i^* u_j d\tau = 0 \quad (II.37)$$

Für Rechnungen ohne Konfigurationsmischungen und Zustände, die aus genau einer Slaterdeterminanten mit den Quantenzahlen M_L und M_S bestehen, d.h. durch die SD ist auch die Spinquantenzahl S eindeutig festgelegt, berechnet sich die Gesamtenergie E_{tot} wie folgt:

$$\begin{aligned} E_{tot} = & \sum_{i=1}^{NWF} q_i I(n_i l_i m_i) + \sum_{i=1}^{NWF} \frac{q_i (q_i - 1)}{2} \sum_k a^k(l_i m_i l_i m_i) F^k(i, i) + \\ & + \sum_{i=2}^{NWF} \sum_{j=1}^{i-1} \{ q_i q_j \sum_k a^k(l_i m_i l_j m_j) F^k(i, j) - \sum_{i_q=1}^{q_i} \sum_{j_q=1}^{q_j} \delta_{m_{s_{i_q}} m_{s_{j_q}}} \sum_k \Sigma b^k(l_i m_i l_j m_j) G^k(i, j) \} + \\ & + \beta(M_L + 2M_S) + \sum_{i=1}^{NWF} q_i \frac{2}{3} [1 - c^2(l_i m_i l_i m_i)] \sigma_R(n_i l_i m_i, n_i l_i m_i) \end{aligned} \quad (II.38)$$

Hierbei gilt:

- Es gibt NWF Sorten äquivalenter Teilchen.
- Die Besetzungszahl q_i der Sorte i ist maximal 2.

Zur expliziten Darstellung der Hartree-Fock-Gleichungen werden noch einige Abkürzungen benötigt, die im folgenden angegeben werden:

$$Y_k(i, j | r) := \frac{1}{r} \int_0^r P_j(r') P_i(r') r'^k dr' + r^{k+1} \int_r^\infty P_j(r') P_i(r') \frac{1}{r'^{k+1}} dr' \quad (\text{II.39})$$

Mit dieser Definition lautet das R^k -Integral (II.20) wie folgt:

$$R^k(ij; st) = \int_0^\infty P_i(r) P_s(r) \frac{1}{r} Y_k(j, t | r) dr \quad (\text{II.40})$$

$$V(lm) := \frac{2}{3} \left[1 + \frac{3m^2 - 1(1+1)}{(2l+3)(2l-1)} \right] \quad (\text{II.41})$$

Ausführen der Variation der $P_i(r)$ in Gl. (II.37) und Einsetzen der obigen Abkürzungen liefert für jede Radialfunktion $P_i(r)$ eine Integrodifferentialgleichung:

$$\begin{aligned} q_i \left[-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2Z}{r} + \frac{1(1+1)}{r^2} + r^2 \beta^2 V(lm) + \lambda_{ii} \right] P_i(r) + \frac{1}{2} q_i (q_i - 1) \sum_k a^{k(l_i m_i l_i m_i)} * \\ * \frac{4}{r} Y_k(ii | r) P_i(r) + \\ + \sum_{j \neq i} \{ q_i q_j \sum_k a^{k(l_i m_i l_j m_j)} \frac{2}{r} Y_k(jj | r) P_i(r) - \sum_{q=1}^{q_i} \sum_{j_q=1}^{q_j} \left[\delta_{m_{s_i} m_{s_j}} \sum_k b^{k(l_i m_i l_j m_j)} * \right. \\ \left. * \frac{2}{r} Y_k(i, j | r) P_j(r) - \delta_{m_i m_j} \delta_{l_i l_j} \lambda_{ij} P_j(r) \right] \} = 0 \quad i=1, \text{ NWF} \quad (\text{II.42}) \end{aligned}$$

Da die Radialwellenfunktionen $P_i(r)$ mit den anderen Funktionen $P_j(r)$ für $j \neq i$ über die Wechselwirkungsintegrale verknüpft sind, stellen die Gl. (II.42) ein gekoppeltes System von Integrodifferentialgleichungen dar, die sogenannten Hartree-Fock-Gleichungen. Die Lösung dieses Gleichungssystems erfolgt iterativ und wird im folgenden kurz skizziert.

Zunächst beschafft man sich Näherungen für die Radialwellenfunktionen $P_i(r)$. Das können z.B. wasserstoffähnliche Einteilchenfunktionen oder bereits für ein anderes Magnetfeld berechnete Radialwellenfunktionen sein. Mit diesen Näherungen berechnet man die Lagrangeschen Parameter λ_{ii} und die Wechselwirkungsintegrale und löst das Gleichungssystem (II.42) für die Radialwellenfunktionen $P_i(r)$.

Mit den neuen Lösungen für die Radialwellenfunktionen berechnet man wieder die Wechselwirkungsintegrale und die Lagrangeschen Parameter λ_{ii} und löst das Gleichungssystem erneut. Dieser Vorgang wird solange wiederholt, bis sich die Radialwellenfunktionen des k -ten Iterationsschrittes von denen des $(k-1)$ -ten Schrittes punktweise um weniger als einen vorgegebenen kleinen Wert unterscheiden. Weiterhin wird auch eine vorgegebene Genauigkeit bei der Berechnung der Gesamtenergie E_{tot} verlangt.

Die so gewonnenen Lösungen sind dann selbstkonsistent, und man berechnet zuletzt die Gesamtenergie E_{tot} nach Gl. (II.38).

Als Beispiel zu diesem Abschnitt möchte ich den Zustand $1s02p-1$ mit $(S, M_L, M_S) = (1, -1, -1)$ des Zweielektronensystems betrachten.

Es gilt: $NWF = 2$

$$q_1 = q_2 = 1 \quad l_1 = 0; m_1 = 0 \quad m_{s_1} = m_{s_2} = -\frac{1}{2}$$

$$l_2 = 1; m_2 = -1$$

Aus Gl. (II.38) ergibt sich damit:

$$E_{\text{tot}} = I(1s0) + I(2p-1) + F^0(2p-1, 1s0) - \frac{1}{3}G^1(2p-1, 1s0) - 3\beta + \\ + \frac{1}{3}\beta^2 \sigma_R(1s0|s0) + \frac{2}{5}\beta^2 \sigma_R(2p-1, 2p-1)$$

Führt man die Variation von E_{tot} nach $P_{1s0}(r)$ und $P_{2p-1}(r)$ aus, so erhält man folgendes System von Differentialgleichungen:

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r} (Z - Y_0(2p2p|r)) + \frac{2}{3}\beta^2 r^2 + \lambda_{1s1s} \right] P_{1s0}(r) - \frac{2}{3r} Y_1(1s2p|r) P_{2p-1}(r) = 0 \\ \left[-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r} (Z - Y_0(1s1s|r)) + \frac{2}{r^3} + \frac{4}{5}\beta^2 r^2 + \lambda_{2p2p} \right] P_{2p-1}(r) - \\ - \frac{2}{3r} Y_1(1s2p|r) P_{1s0}(r) = 0$$

III. Dipolstärken, Oszillatorstärken und Übergangswahrscheinlichkeiten.

Ein fundamentaler Bestandteil der Quantenmechanik ist die Berechnung elektromagnetischer Übergänge, die mit Hilfe der "Goldenen Regel" erfolgen kann [13].

Die endgültigen Gleichungen für Übergänge im feldfreien Fall, die man in der Literatur findet, können nicht einfach auf Atome im Magnetfeld angewendet werden. Deshalb muß die Ableitung der Gleichungen für die Beschreibung der Übergangswahrscheinlichkeiten neu durchgeführt werden.

Für Einelektronensysteme wurde diese Ableitung der Gleichungen von Wunner et al. [5] durchgeführt. In diesem Abschnitt werden nun diese Gleichungen verallgemeinert, um auch N-Elektronensysteme beschreiben zu können. Die Anwendung der Gleichungen auf das Zweielektronensystem wird explizit angegeben.

III.1. Dipolmatrixelemente.

Die Wellenfunktionen bestehen aus Slaterdeterminanten der Form (II.5). Wir betrachten den Übergang von einem Atomzustand $\tau' = |\phi_{\alpha'S'M'_L M'_S}\rangle$ als Anfangszustand in den Atomzustand $\tau = |\phi_{\alpha S M_L M_S}\rangle$ als Endzustand.

Der Dipoloperator $\underline{r}$ ist ein Einteilchenoperator, sodaß Matrixelemente nur für Slaterdeterminanten existieren,

die sich in genau einem Teilchen unterscheiden.

Das Dipolmatrixelement $p_{\tau'\tau}^{(q)}$ des oben bezeichneten

Übergangs wird nun wie folgt definiert:

$$p_{\tau'\tau}^{(q)} = \langle \tau' | \sum_{i=1}^N r_i^{(q)} | \tau \rangle \quad q = 0; \pm 1 \quad (III.1)$$

Hierbei ist $r_i^{(q)}$ die q -te Komponente des Tensoroperators 1. Stufe $\underline{r}$, der den Ort des Teilchens 'i' beschreibt.

Es gilt:

$$\underline{r}_i = \sum_{q=-1}^{+1} (-1)^q r_i^{(q)} \underline{e}_{-q} \quad (III.2)$$

mit den Komponenten

$$\begin{aligned} r_i^{(0)} &= z = r_i \cos \theta_i = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r_i Y_{10}(\theta_i, \phi_i) \\ r_i^{(\pm 1)} &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (x_i \pm i y_i) = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} r_i \sin \theta_i e^{\pm i \phi_i} = \\ &= \pm \sqrt{\frac{2\pi}{3}} r_i Y_{1\pm 1}(\theta_i, \phi_i) \end{aligned} \quad (III.3)$$

und den Einheitsvektoren

$$\begin{aligned} \underline{e}_0 &= \underline{e}_z \\ \underline{e}_{\pm 1} &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\underline{e}_x \pm i \underline{e}_y) \end{aligned} \quad (III.4)$$

Die Dipolstärke eines Übergangs wird definiert als Quadrat des Dipolmatrixelementes $p_{\tau'\tau}^{(q)}$.

Auswahlregeln:

Aufgrund der Eigenschaften der Y_{lm} -Funktionen ergeben sich folgende Auswahlregeln für Dipolübergänge von einem Zustand τ' in den Zustand τ :

$$(i) \quad \Delta m = m' - m = 0; \pm 1$$

$$(ii) \quad P' * P = -1 \quad \text{mit} \quad P' = (-1)^{\sum_{i=1}^N l'_i} \quad \text{und} \quad P = (-1)^{\sum_{i=1}^N l_i}$$

d.h. die Zustände müssen verschiedene Parität haben, und außerdem muß die Differenz der l-Quantenzahlen der Elektronen, in denen sich die SD unterscheiden, 1 sein, da Y_{1q} die q-te Komponente eines Tensors 1. Stufe ist.

III.2. Oszillatorstärke und Übergangswahrscheinlichkeit.

Wir betrachten hier wiederum den $\Delta m = q$ Dipol-Übergang. Die Oszillatorstärke $f_{\tau'\tau}^{(q)}$ dieses Übergangs wird definiert als Produkt aus Dipolstärke und Energiedifferenz $\Delta E_{\tau'\tau}$ der beiden Atomzustände.

$$f_{\tau'\tau}^{(q)} = \frac{\Delta E_{\tau'\tau}}{E_H} \left| p_{\tau'\tau}^{(q)} \right|^2 \quad (III.5)$$

Die totale Übergangswahrscheinlichkeit $w_{\tau'\tau}$ von einem Zustand τ' in einen Zustand τ wird wie folgt definiert:

$$w_{\tau'\tau}^{(q)} = \frac{1}{\tau_0} \left(\frac{\Delta E_{\tau'\tau}}{E_H} \right)^3 \frac{1}{3} |p_{\tau'\tau}^{(q)}|^2 \quad (\text{III.6})$$

$$\tau_0 = \frac{2\pi\hbar}{\alpha^2 c} = 1.245 \cdot 10^{-10} \text{ sec}$$

III.3. Das Zweielektronensystem.

Das Dipolmatrixelement $p_{\tau'\tau}^{(q)}$ aus Gl. (III.1) läßt sich in Form einer Summe von Produkten aus Einteilchenmatrixelementen und Überlappintegralen schreiben. Im folgenden will ich speziell für das Zweielektronensystem die Summe explizit für den Fall angeben, daß die Wellenfunktionen aus genau einer SD bestehen. Es gilt dann:

$$\tau = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_1(1)u_2(2) - u_1(2)u_2(1)) \quad (\text{III.7})$$

$$\tau' = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_1'(1)u_2'(2) - u_1'(2)u_2'(1))$$

Hierbei sind die $u_j(i)$ Einteilchenwellenfunktionen gemäß Gl. (II.4).

Das Dipolmatrizelement lautet dann:

$$\begin{aligned}
 p_{\tau' \tau}^{(q)} = & \\
 = \frac{1}{2} \{ & \langle u_1'(1) | r_1^{(q)} | u_1(1) \rangle \langle u_2'(2) | u_2(2) \rangle + \langle u_2'(2) | r_2^{(q)} | u_2(2) \rangle \langle u_1'(1) | u_1(1) \rangle - \\
 & - \langle u_1'(1) | r_1^{(q)} | u_2(1) \rangle \langle u_2'(2) | u_1(2) \rangle - \langle u_2'(2) | r_2^{(q)} | u_1(2) \rangle \langle u_1'(1) | u_2(1) \rangle - \\
 & - \langle u_2'(1) | r_1^{(q)} | u_1(1) \rangle \langle u_1'(2) | u_2(2) \rangle - \langle u_1'(2) | r_2^{(q)} | u_2(2) \rangle \langle u_2'(1) | u_1(1) \rangle + \\
 & + \langle u_2'(1) | r_1^{(q)} | u_2(1) \rangle \langle u_1'(2) | u_1(2) \rangle + \langle u_1'(2) | r_2^{(q)} | u_1(2) \rangle \langle u_2'(1) | u_2(1) \rangle \} \\
 & \text{(III.8)}
 \end{aligned}$$

Zur Berechnung des Dipolmatrizelementes müssen erstens die Überlappintegrale $\langle u_j', (i) | u_j(i) \rangle$ und zweitens die Einteilchendipolmatrizelemente bestimmt werden. Die Überlappintegrale sind nur für $l = l'$, $m = m'$ und $m_s = m'_s$ von Null verschieden und haben folgende Form:

$$\langle u_j', (i) | u_j(i) \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta_{m_s m'_s} \int_0^\infty P_{n', lm}'(r) P_{nlm}(r) dr \quad \text{(III.9)}$$

Für das Radialintegral gilt die Gl. (II.4a) nicht, da $P'(r)$ und $P(r)$ durch verschiedene Hartree-Fock Rechnungen bestimmt wurden.

Die Gleichungen zur Berechnung der in Gl. (III.8) auftretenden Einteilchendipolmatrizelemente $d_{\tau' \tau}^{(q)}$ werden im folgenden angegeben.

(i) $q = 0$

$$d_{\tau' \tau}^{(0)} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{x} P'(r) Y_{1, m'}^* x \cos \theta \frac{1}{x} P(r) Y_{1m} x^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \delta_{m_s m'_s} =$$

$$\begin{aligned}
 &= \int_0^{\infty} r P'(r) P(r) dr \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_{1,m}^* Y_{10} Y_{1m} \sin\theta d\theta d\phi = \\
 &= (-1)^{m'} [(2l'+1)(2l+1)]^{1/2} \begin{pmatrix} l' & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & 1 & 1 \\ -m' & 0 & m \end{pmatrix} \sigma_{\tau',\tau}(r) \quad (\text{III.10})
 \end{aligned}$$

Abkürzung:

$$\sigma_{\tau',\tau}(r) = \int_0^{\infty} r P'(r) P(r) dr \quad (\text{III.11})$$

Das Dipolmatrixelement verschwindet nur dann nicht, wenn gilt:

$$\begin{aligned}
 l' + 1 + 1 & \quad \text{gerade} & \quad \text{und} & \quad l' = l \pm 1 \\
 m = m' & \quad \text{d.h.} \quad \Delta m = 0 & & (\text{III.12})
 \end{aligned}$$

(ii) $q = +1$

$$d_{\tau',\tau}^{(1)} = (-1)^m [(2l'+1)(2l+1)]^{1/2} \begin{pmatrix} l' & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & 1 & 1 \\ -m' & 1 & m \end{pmatrix} \sigma_{\tau',\tau}(r) \quad (\text{III.13})$$

Das Dipolmatrixelement $d_{\tau',\tau}^{(+1)}$ verschwindet nur dann nicht, wenn gilt:

$$\begin{aligned}
 l' + 1 + 1 & \quad \text{gerade} & \quad \text{und} & \quad l' = l \pm 1 \\
 m' = m + 1 & \quad \text{d.h.} \quad \Delta m = 1 & & (\text{III.14})
 \end{aligned}$$

(iii) $q = -1$

$$d_{\tau', \tau}^{(-1)} = (-1)^{m'} [(2l'+1)(2l+1)]^{1/2} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m' & -1 & m \end{pmatrix} \sigma_{\tau', \tau}(r) \quad (\text{III.15})$$

Das Dipolmatrixelement $d_{\tau', \tau}^{(-1)}$ verschwindet nur dann nicht, wenn gilt:

$$\begin{aligned} l' + l + 1 & \quad \text{gerade} & \quad \text{und} & \quad l' = l \pm 1 \\ m' = m - 1 & \quad \text{d.h.} \quad \Delta m = -1 & & (\text{III.16}) \end{aligned}$$

Zusammenfassend lassen sich folgende Auswahlregeln für die Einteilchenmatrixelemente angeben:

$$\begin{aligned} l' + l + 1 & \quad \text{gerade} & \quad \text{und} & \quad l' = l \pm 1 \\ m' = m + q & \quad \text{d.h.} \quad \Delta m = q \end{aligned}$$

Hieraus lassen sich sofort die in Kapitel III.1. angegebenen Auswahlregeln für das N-Elektronensystem ableiten.

IV. Programmbeschreibung.

In diesem Abschnitt erfolgt die Beschreibung der Computerprogramme zur numerischen Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen (II.42) und zur Berechnung von Dipolstärken und Oszillatorstärken elektromagnetischer Übergänge (Abschnitt III.).

IV.1. Multikonfiguration Hartree-Fock Programm mit Magnetfeld.

Es soll nun zunächst das Computerprogramm zur numerischen Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen (II.42), d.h. zur selbstkonsistenten Berechnung der Wellenfunktionen und Energie eines N-Elektronensystems, beschrieben werden. Ausgangspunkt dieses Programmes ist das Multikonfiguration Hartree-Fock Programm MCHF77 von Charlotte Froese Fischer [14], das numerische, nichtrelativistische Hartree-Fock Ergebnisse für gebundene Zustände von N-Elektronensystemen ohne äußeres Magnetfeld innerhalb einer Multikonfigurationsnäherung bestimmt.

Beschreibungen und Ergebnisse dieses Programms findet man in den Artikeln von Frau Froese Fischer [14,15,16,17] und in den Diplomarbeiten von W. Dittrich [18] und H. Hofmann [19]. In dieser Arbeit sollen nur die Programmteile beschrieben werden, die gegenüber dem ursprünglichen Programm geändert wurden, um die Untersuchung von Mehrelektronensystemen im äußeren, homo-

genen Magnetfeld zu ermöglichen. Im Anschluß daran findet man eine Beschreibung der Eingabedaten des Multikonfiguration Hartree-Fock Programms mit Magnetfeld.

IV.1.1. Beschreibung der Unterprogramme.

SUBROUTINE ARRAY

Das Unterprogramm ARRAY berechnet die Koeffizienten $a^k(lm, l'm')$ und $b^k(lm, l'm')$ für die Gesamtenergie E_{tot} nach Gl. (II.38). Die Koeffizienten a^k und b^k sind definiert gemäß Gl. (II.25) und (II.26) durch die Koeffizienten $c^k(lml'm')$, die mit Hilfe der Gl. (II.22) berechnet werden. Zusammen mit den Konfigurationsmischungskoeffizienten c_γ (vgl. Gl. (II.8)) werden die Vorfaktoren für die Ausdrücke $Y_k(ij|r)$ in den Hartree-Fock Gleichungen bestimmt. Die Berechnung der Gesamtenergie E_{tot} erfolgt nicht mehr nach dem Prinzip der mittleren Energie E_{av} , das zum Beispiel von Slater verwendet wird [20], sondern direkt mit Hilfe von Clebsch-Gordan Koeffizienten (3j-Symbolen), sodaß sie für beliebige Drehimpulse bestimmt werden kann.

SUBROUTINE DATA

Das Unterprogramm DATA liest alle notwendigen Daten ein, die als Startwerte für die Iteration erforderlich sind. Da die Gesamtenergie E_{tot} einer Konfiguration im Unter-

programm ARRAY vollständig berechnet wird, brauchen die Vorfaktoren für die F^k und G^k -Integrale, um die sich die mittlere Energie E_{av} und die Gesamtenergie E_{tot} unterscheiden, nicht eingelesen werden. Bei Konfigurationsmischungen werden die Koeffizienten der Wechselwirkungsintegrale zwischen den Konfigurationen eingelesen. Mit dem Operator der elektrostatischen Wechselwirkung $\frac{1}{r_{12}}$ Gl. (II.17) können R^k -Integrale auftreten (Gl. (II.20)). Mit dem Einteilchenoperator L Gl. (II.15) können nichtdiagonale Matrixelemente nach Gl. (II.14) vorkommen, und der diamagnetische Wechselwirkungsoperator $\beta^2 r^2 \sin^2 \theta$ erlaubt die Mischung verschiedener Drehimpulse und ergibt nichtdiagonale Matrixelemente gemäß Gl. (II.12). Weiterhin sind in DATA die Koeffizienten $\frac{3}{2}V(lm)$ nach Gl. (II.41) für Drehimpulse l mit $0 \leq l \leq 6$ und beliebigem m programmiert und werden den entsprechenden Elektronen zugeordnet.

SUBROUTINE DIAG

Im Unterprogramm DIAG wird im Fall einer Konfigurationsmischung die Energiematrix aufgestellt, wobei sowohl Beträge elektrostatischer als auch magnetischer Natur berücksichtigt werden können. Die Bestimmung eines Eigenwertes und des zugehörigen Eigenvektors $\underline{c} = (c_{\gamma})_{\gamma=1, NCFG}$ erfolgt iterativ.

FUNCTION HL

Das Funktionsunterprogramm berechnet das folgende Integral:

$$HL(i,j) = \int_0^\infty P_{n_j l_j m_j}(r) \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2Z}{r} - \frac{l_j(l_j+1)}{r^2} + \beta^2 V(l_i m_i) r^2 \right] P_{n_i l_i m_i} \delta_{l_j l_i} \delta_{m_j m_i} dr \quad (IV.1)$$

Dieses Integral liefert für $i = j$ die Einelektronenenergie des Elektrons i mit dem diamagnetischen, aber ohne den paramagnetischen Beitrag βm_i und ohne Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen den Elektronen.

SUBROUTINE INIT

Im Unterprogramm INIT werden die Grundkonstanten des Programms definiert. Die Konstanten, die im Programm von Frau Froese Fischer die mittlere Energie E_{av} einer Konfiguration definiert haben, werden in diesem Programm nicht mehr benötigt.

SUBROUTINE NMRVS und LETZT

Das Unterprogramm NMRVS löst eine Differentialgleichung der Form:

$$\frac{d^2}{dr^2} f(r) = F(r) f(r) + G(r) \quad (IV.2)$$

$$\text{mit } F(r) = \frac{2}{r} (Z - a^k Y_k) - \frac{l(l+1)}{r^2} + r^2 \beta^2 V(lm) + \lambda \quad (IV.3)$$

mit Hilfe der Numerov-Methode [16,17].

Der diamagnetische Anteil des Potentials, der proportional zu r^2 verläuft, hat vor allem für die Schwanzprozedur der Numerov-Methode große Auswirkungen. Die Randbedingung im Unendlichen kann nicht mehr wie im feldfreien Fall durch die Gl. (IV.4), die unter der Voraussetzung abgeleitet wurde, daß die Summe aus effektivem Potential und Lagrangeschem Parameter λ für $r \rightarrow \infty$ konstant ist, beschrieben werden [10,17], sondern es muß eine andere Methode angewendet werden.

$$\frac{f_{M+1}}{f_M} \approx \left(\frac{F_M}{F_{M+1}} \right)^{1/4} e^{-F_M^{1/2} \Delta r} \quad \begin{aligned} f_M &= f(r_M) \\ F_M &= F(r_M) \\ \Delta r &= r_{M+1} - r_M \end{aligned} \quad (IV.4)$$

Mit Hilfe der WKB-Näherung erhält man folgenden Ausdruck zur Beschreibung der Randbedingung im Unendlichen für die Differentialgleichung (IV.2).

$$\frac{f_{M+1}}{f_M} \approx \exp \left(- \int_{r_M}^{r_{M+1}} \sqrt{V_{eff}^{lm}(r) + \lambda} dr \right) \quad (IV.5)$$

$$\text{mit } V_{eff}^{lm}(r) := F(r) - \lambda \quad (IV.6)$$

Die Gl. (IV.5) wird im Unterprogramm LETZT berechnet, das Integral in den Grenzen r_M und r_{M+1} wird durch Simpson-Integration mit 11 Stützstellen bestimmt. Die Wahl des Abbruchkriteriums (Bestimmung des Punktes r_M) erfolgte gemäß einem Vorschlag von W. Rösner [10].

Die Berechnung des effektiven Potentials $V_{\text{eff}}^{1m}(r)$ an den Zwischenpunkten von r_{M+1} und r_M erfolgte durch parabolische Interpolation mit den 3 Punkten r_{M-1} , r_M und r_{M+1} gemäß Gl. (IV.7), da innerhalb des Programmes die Größen $Y_k(r)$ nur an den logarithmischen Stützpunkten vorliegen.

$$V_{\text{eff}}^{1m}(r) = a_1 r^2 + a_2 r + a_3 \quad (\text{IV.7})$$

Für die Koeffizienten a_i $i=1,3$ erhält man folgende Ausdrücke (h ist die Schrittweite der logarithmischen Skala).

$$a_1 = \frac{[V_{\text{eff}}^{1m}(r_M)(e^h - e^{-h}) + V_{\text{eff}}^{1m}(r_{M+1})(e^{-h} - 1) + V_{\text{eff}}^{1m}(r_{M-1})(1 - e^h)]}{r_{M+1}^2 [e^{-4h} - 2e^{-3h} + 2e^{-h} - 1]} \quad (\text{IV.8})$$

$$a_2 = \frac{[V_{\text{eff}}^{1m}(r_M)(e^{-3h} - e^h) + V_{\text{eff}}^{1m}(r_{M+1})(e^{-h} - e^{-3h}) + V_{\text{eff}}^{1m}(r_{M-1})(e^h - e^{-h})]}{r_{M+1} [e^{-4h} - 2e^{-3h} + 2e^{-h} - 1]} \quad (\text{IV.9})$$

$$a_3 = \frac{[V_{\text{eff}}^{1m}(r_M)(e^{-h} - e^{-3h}) + V_{\text{eff}}^{1m}(r_{M+1})(e^{-4h} - e^{-3h}) + V_{\text{eff}}^{1m}(r_{M-1})(e^{-h} - 1)]}{[e^{-4h} - 2e^{-3h} + 2e^{-h} - 1]} \quad (\text{IV.10})$$

und durch Einsetzen von $h = \frac{1}{16}$ erhält man:

$$a_1 = \frac{1}{r_{M+1}^2} [-289.99279 V_{\text{eff}}^{1m}(r_M) + 140.46664 V_{\text{eff}}^{1m}(r_{M+1}) + 149.52615 V_{\text{eff}}^{1m}(r_{M-1})]$$

$$a_2 = \frac{1}{r_{M+1}} [545.91042 V_{\text{eff}}^{1m}(r_M) - 255.91763 V_{\text{eff}}^{1m}(r_{M+1}) - 289.99279 V_{\text{eff}}^{1m}(r_{M-1})]$$

$$a_3 = [-255.91763 V_{\text{eff}}^{1m}(r_M) + 116.45099 V_{\text{eff}}^{1m}(r_{M+1}) + 140.46664 V_{\text{eff}}^{1m}(r_{M-1})]$$

SUBROUTINE SOLVE und XCH

Bei der Berechnung der Coulomb- und Austauschfunktion für die zu lösende Hartree-Fock Gleichung werden die Beiträge des diamagnetischen Wechselwirkungsoperators $\beta^2 r^2 \sin^2 \theta$ im Unterprogramm SOLVE mit berücksichtigt. Die nichtdiagonalen Beiträge zur Gesamtenergie des diamagnetischen Operators werden bei Konfigurationsmischungen im Unterprogramm XCH zur Austauschfunktion hinzugefügt.

SUBROUTINE CG

Das Unterprogramm CG berechnet die in ARRAY und DIAG zur Ermittlung der Gesamtenergie einer Konfiguration benötigten Clebsch-Gordan Koeffizienten. Die Größen $s!$ werden durch das Unterprogramm FAKUL für $s=0$ bis 50 berechnet und abgespeichert. Mit dem Funktionsaufruf FAK(s) werden die gewünschten Fakultäten den Unterprogrammen zugänglich gemacht.

IV.1.2. Beschreibung der Eingabedaten.

In diesem Abschnitt wird beschrieben, mit welchen Daten das Programm gesteuert werden kann. Die Verteilung der Daten erfolgt auf die 3 Eingabefiles INPUT, ISOMAG und WAVIN.

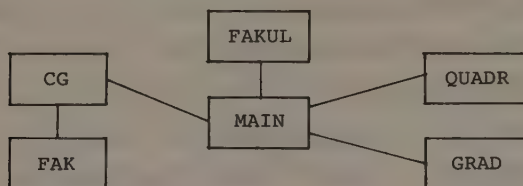
Der File INPUT enthält alle Daten, die zur Charakterisierung des zu lösenden Problems notwendig sind. Das sind Kernladungszahl Z , Stärke des Magnetfeldes β_z , Anzahl der Wellenfunktionen NWF, Anzahl der Konfigurationen NCFG und Anzahl der auftretenden nichtdiagonalen Matrixelemente zwischen den Konfigurationen NR, NL und NLB. Weiterhin werden hier die NCFG Konfigurationen und ihre Mischungskoeffizienten definiert. Anschließend werden für NWF Wellenfunktionen die Quantenzahlen und die Besetzungszahlen in den Konfigurationen angegeben, sowie die Wahl der Startwellenfunktionen getroffen. Falls nichtdiagonale Matrixelemente auftreten, werden ihre Vorfaktoren, und bei R^k -Integralen der Wert von k , sowie die in den Matrixelementen vorkommenden Wellenfunktionen eingelesen.

Im File ISOMAG stehen alle Angaben, die das Vorgehen bei der Iteration festlegen. Das sind die Anzahl der Iterationsschritte und die Genauigkeitsschranken für die Wellenfunktionen und die Energie. Weiterhin sind hier alle notwendigen Daten zur eventuellen Berechnung des vorliegenden Problems mit anderer Kernladungszahl Z oder Magnetfeldstärke β_z , d.h. zur Berechnung einer isoelektronischen oder isomagnetischen Reihe des Problems angegeben. Sollen als Startwellenfunktionen für das Problem bereits bei einem anderen Lauf berechnete Wellenfunktionen verwendet werden, so werden diese vom File WAVIN gelesen. Bei der Wahl von abgeschirmten Wasserstoffwellenfunktionen als Startwellenfunktionen wird dieser File nicht benötigt.

IV.2. Numerische Berechnung der Dipolstärke und Oszillatorstärke eines Dipolübergangs.

In diesem Abschnitt wird das Computerprogramm zur numerischen Berechnung der Dipol- und Oszillatorstärke eines Dipolübergangs beschrieben. Die Berechnung des Dipolmatrixelementes $p_{\tau'\tau}^{(q)}$, deren Quadrat die Dipolstärke ergibt, erfolgt gemäß Gl. (III.8) als Summe von Produkten aus Einteilchendipolmatrixelementen $d_{\tau'\tau}^{(q)}$ (Gl. III.10, III.13 und III.15) und Überlappintegralen (Gl. III.9). Das Programm berechnet nur die aufgrund von Auswahlregeln von null verschiedenen Summanden der Gl. (III.8), die in den Eingabedaten angegeben werden müssen. Zur Berechnung des Radialanteiles der Matrixelemente und Überlappintegrale werden die numerischen Hartree-Fock Radialwellenfunktionen verwendet, die mit dem Multikonfiguration Hartree-Fock Programm mit Magnetfeld iterativ für den Anfangs- und Endzustand bestimmt wurden. Die Winkelanteile der Matrixelemente werden als Produkt von Clebsch-Gordan Koeffizienten, die mit Hilfe des Unterprogrammes CG bestimmt werden, direkt berechnet. Die Oszillatorstärke $f_{\tau'\tau}^{(q)}$ des $\Delta m = q$ Dipolübergangs erhält man nach Gl. (III.5) als Produkt aus Dipolstärke und Energiedifferenz $\Delta E_{\tau'\tau}$ der beiden Atomzustände τ' und τ .

Das Programm besteht aus dem Hauptprogramm MAIN, den Unterprogrammen QUADR, GRAD und FAKUL, sowie den Funktionsunterprogrammen CG und FAK.



Das Hauptprogramm liest die Daten ein, berechnet die Dipolmatrixelemente und gibt die Ergebnisse aus.

Das Unterprogramm QUADR (i,j,k) berechnet das Integral

$$\int_0^{\infty} P_{n_i l_i m_i}(r) r^k P_{n_j l_j m_j}(r) dr \quad \text{mit Hilfe der Simpson-Regel.}$$

Das Unterprogramm GRAD (i,j) berechnet das Integral

$$\int_0^{\infty} P_{n_i l_i m_i}(r) \left[-\frac{d}{dr} \pm \frac{1}{r} \right] P_{n_j l_j m_j}(r) dr \quad \text{wobei} \begin{cases} + & \text{falls } l_j < l_i \\ - & \text{falls } l_i < l_j \end{cases}$$

Das Unterprogramm FAKUL berechnet die Fakultäten s! von s=0 bis 50 und speichert sie im COMMON FAK ab.

Mit dem Funktionsaufruf CG (L1,L2,M1,M2,L,M) wird ein Clebsch-Gordan Koeffizient berechnet, und mit dem Aufruf FAK(s) wird die Größe s! aus dem COMMON FAK abgerufen.

Die Verteilung der Eingabedaten für das Programm erfolgt auf die drei Eingabefiles INPUT, WAVIN und WAVFI, die den Kanalnummern IREAD2, IREAD1 und IREAD3 zugeordnet werden müssen.

Vom File INPUT werden drei Arten von Daten eingelesen. Einmal sind das die Daten, die das Atom, die gemischten Konfigurationen usw. spezifizieren. Weiterhin werden Kontrollzeichen eingelesen, die es erlauben, die Rechnungen für eine isomagnetische oder isoelektronische Reihe durchzuführen. Zum anderen werden die Übergangsdaten eingelesen, die die von null verschiedenen Summanden der Gl. (III.8) kennzeichnen.

Die Radialwellenfunktionen des Anfangszustandes des Dipolübergangs werden vom File WAVIN, die des Endzustandes werden vom File WAVFI gelesen.

V. Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden nun die Ergebnisse der Berechnungen dargestellt. Zunächst werden die Gesamtenergien des Zweielektronensystems im homogenen Magnetfeld, erhalten mit einem 1-Konfigurationsansatz, in tabellarischer Form aufgeführt. Bei gegebener Kernladungszahl Z werden in einer Tabelle für zwei magnetische Quantenzahlen m die Gesamtenergien einiger Zustände in Einheiten von $-E_Z = -Z^2 E_H$ im Bereich von $10^{-4} \leq \beta_Z \leq 10^3$ angegeben. Diese Tabellen werden für die vier Atome Fe XXV ($Z=26$), Si XIII ($Z=14$), O VII ($Z=8$) und He I ($Z=2$) und die magnetischen Quantenzahlen $m = 0, -1, -2$ und -3 aufgestellt. Die Gesamtenergien der Grundzustände mit $m = -1, -2$ und -3 des H^- -Ions ($Z=1$) für den obigen β_Z -Bereich sind in einer weiteren Tabelle zu finden, der auch die Ergebnisse eines 2-Konfigurationsansatzes für den $m = -1$ Grundzustand zu entnehmen sind. In graphischer Form werden die Gesamtenergien der DTB Zustände mit $m = -1, -2$ und -3 der Atome Fe XXV, He I und H^- in Abhängigkeit von β_Z aufgetragen. Für einige β_Z -Werte wird die Z -Abhängigkeit der Energien dieser Zustände diskutiert und graphisch dargestellt.

Anschließend werden die Ionisierungsenergien des Zweielektronensystems untersucht, und ihr Verlauf in Abhängigkeit von β_Z für die Atome Fe XXV und He I durch eine Abbildung veranschaulicht.

Der Einfluß von Konfigurationsmischungen auf die Güte der Gesamtenergien wird bei Berechnungen mit der kugel-

symmetrischen Basis am Beispiel von Fe XXV und He I für einige Zustände untersucht. Die Energiewerte werden tabellarisch angegeben und an Hand einer Abbildung für He I mit den Ergebnissen der 1-Konfigurationsrechnung verglichen.

Abschließend werden dann Wellenlängen λ und Oszillatorstärken f einiger Übergänge in Dipolnäherung am Beispiel von He I untersucht. Für Magnetfelder mit $5 \cdot 10^{-5} \leq \beta_Z \leq 10^{-2}$ werden die Wellenlängen und Oszillatorstärken tabellarisch aufgeführt und Literaturwerten gegenübergestellt [21,22]. Zur Veranschaulichung des Spektrums von He I wird die Abhängigkeit von Wellenlängen und Oszillatorstärken graphisch dargestellt. Der Verlauf der Wellenlängen im Bereich $10^{-2} \leq \beta_Z \leq 10$, d.h. im Übergangsbereich von kugelsymmetrischer zu zylindersymmetrischer Basis, wird an Hand einer Abbildung untersucht.

V.1. Energieniveaus von Zweielektronensystemen im homogenen Magnetfeld bei einem 1-Konfigurationsansatz.

Für die Zustände mit magnetischer Quantenzahl ($-m$) ≤ 3 werden hier für die Zweielektronensysteme Fe XXV, Si XIII, O VII, He I und H^- numerische Ergebnisse vorgelegt, die in 1-Konfigurationsrechnungen bestimmt wurden. In tabellarischer Form werden die Gesamtenergien einiger Zustände für die angegebenen Zweielektronensysteme im Bereich $10^{-4} \leq \beta_Z \leq 10^3$ dargestellt.

Die Berechnung der Energiewerte erfolgte für β_Z -Werte oberhalb des in den Tabellen angegebenen, durchgezogenen Querstriches (oder einer eventuell auftretenden Lücke) in kugelsymmetrischer Basis mit Hilfe des in Abschnitt IV.1. vorgestellten Programmes, während sie unterhalb davon in zylindersymmetrischer Basis mit einem von mir verbesserten Programm von H. Körbel [23] durchgeführt wurden, welches eine Erweiterung des von P. Pröschel [24] erstellten Programmes auf angeregte Zustände beinhaltet. Die Zustände sind im kugelsymmetrischen Fall durch die Einelektronenquantenzahlen (Grenzfall $\beta_Z \rightarrow 0$; $\frac{1}{Z} \rightarrow 0$) $n_1 l_1 m_1; n_2 l_2 m_2$ bzw. im zylindersymmetrischen Fall (Grenzfall $\beta_Z \rightarrow \infty$ und $\frac{1}{Z} \rightarrow 0$) durch $n_{L_1} m_1 v_1; n_{L_2} m_2 v_2$ gekennzeichnet, wobei das Elektron $1s_0$ bzw. 000 immer weggelassen wird.

Bei Zuständen, die bezüglich der magnetischen und elektrostatischen Wechselwirkungsenergie unterschiedliche Aufspaltungscharakteristik besitzen (vgl. Abschnitt I.4.1.) und bei einem 1-Konfigurationsansatz einen Kreuzungspunkt haben, sind in einer Spalte diese 2 Zustände angegeben, wobei oberhalb der gestrichelten Linie die Energien des oberen und unterhalb diejenigen des unteren Zustandes stehen. (Tabellen 7 - 14)

Um bereits an dieser Stelle ein Gefühl für die Güte der berechneten Energiewerte zu vermitteln, ist für den tiefsten Zustand mit $m = -2$ bei einigen, in kugelsymmetrischer Basis berechneten Energiewerten zusätzlich

Zustand

β_Z	m = 0				m = -1				
	$2p_0/001$	$2s_0/002$	$3p_0/003$	$3d_0/004$	$2p_{-1}/0-10$	$3d_{-1}/0-11$	$3p_{-1}/0-12$	$4d_{-1}/0-13$	$4p_{-1}/0-14$
1 10^{-4}	1.233240	1.236078	1.103608	1.104395	1.233439	1.103349	1.103807	1.058393	1.058579
1.5 10^{-4}	1.233439	1.236278	1.103807	1.104593	1.233739	1.103648	1.104105	1.058689	1.058873
2 10^{-4}	1.233639	1.236478	1.104005	1.104790	1.234039	1.103947	1.104402	1.058984	1.059163
3 10^{-4}	1.234038	1.236876	1.104401	1.105183	1.234637	1.104543	1.104994	1.059568	1.059738
5 10^{-4}	1.234836	1.237671	1.105189	1.105959	1.235833	1.105730	1.106169	1.060718	1.060855
7 10^{-4}	1.235632	1.238464	1.105970	1.106724	1.237026	1.106911	1.107332	1.061843	<u>1.061932</u>
1 10^{-3}	1.236825	1.239648	1.107129	1.107849	1.238812	1.108670	1.109052	1.063485	1.063576
1.5 10^{-3}	1.238806	1.241609	1.109031	1.109665	1.241778	1.111571	1.111858	1.066100	1.066318
2 10^{-3}	1.240781	1.243554	1.110893	1.111408	1.244730	1.114432	1.114587	1.068568	1.068960
3 10^{-3}	1.244707	1.247398	1.114501	<u>1.114680</u>	1.250592	1.120038	1.119820	1.073096	1.073965
5 10^{-3}	1.252471	1.254901	1.121264	1.121110	1.262154	1.130800	1.129431	1.080732	1.082985
7 10^{-3}	1.260118	1.262158	1.127455	1.127590	1.273500	1.141001	1.138004	1.086869	1.090925
1 10^{-2}	1.271373	1.272594	1.135764	1.136499	1.290125	1.155371	1.149198	1.094034	1.101309
1.5 10^{-2}	1.289565	1.288830	1.147385	1.149517	1.316831	1.177250	1.164340	1.102311	1.115751
2 10^{-2}	1.307080	1.303709	1.156753	1.160700	1.342373	1.197095	1.176196	1.107583	1.127745
3 10^{-2}	1.340228	1.329831	1.170505	1.179004	1.390401	1.232368	1.193188	1.112549	1.146998
5 10^{-2}	1.400051	1.370227	1.185038	1.204875	1.476779	1.291439	1.210865		1.174195
7 10^{-2}	1.452941	1.398627	1.188830	1.221575	1.553640	1.340842	1.215705		1.192332
1 10^{-1}	1.522363	1.424986		1.235441	1.656296	1.403273			1.208826
1.5 10^{-1}	1.618597	1.438652		1.238507	1.803880	1.486558			1.217332
2 10^{-1}	1.697063				1.930817	1.551922			
3 10^{-1}	1.817005				2.142909	<u>1.646463</u>			
5 10^{-1}	<u>1.963311</u>	1.643156	1.530050	1.480786	2.463514	1.749408	1.594581	1.510799	1.467585
7 10^{-1}	2.080797	1.857436	1.734683	1.682927	2.701274	1.982693	1.808547	1.716222	1.670059
1	2.357844	2.112849	1.979660	1.925456	<u>2.965275</u>	2.259447	2.063867	1.962138	1.912967
2	2.991028	2.705089	2.551153	2.492874	3.844768	2.895296	2.656552	2.535684	2.425007
5	4.057023	3.723804	3.541790	3.479778	5.480077	3.971097	3.676852	3.529287	3.469143
1 10^1	5.074973	4.714647	4.511069	4.447617	7.101377	5.000093	4.669404	4.500813	4.437782
2 10^1	6.313945	5.935712	5.710421	5.646716	9.127898	6.251628	5.892443	5.702264	5.637656
5 10^1	8.359299	7.971556	7.717632	7.655182	12.55574	8.313237	7.931114	7.711816	7.647074
1 10^2	10.27113	9.885381	9.610112	9.549565	15.81871	10.23556	9.847147	9.605704	9.542123
2 10^2	12.54762	12.16975	11.87370	11.81558	19.75189	12.52037	12.13370	11.87037	11.80875
5 10^2	16.19450	15.83279	15.51050	15.45602	26.12550	16.17499	15.79961	15.50813	15.44994
1 10^3	19.49248	19.14530	18.80430	18.75267	31.94415	19.47683	19.11425	18.80238	18.74710

Tabelle 7: Gesamtenergien in Einheiten von $-E_Z$ der 4 tiefsten m = 0 und der 5 tiefsten m = -1 Zustände im Bereich von $10^{-4} \leq \beta_Z \leq 10^3$ für Fe XXV (Z=26) bei 1-Konfigurationsrechnung. Oberhalb des durchgezogenen Striches (oder einer Lücke) Rechnung in kugelsymmetrischer, unterhalb in zylindrischer Basis. Die Bedeutung der gestrichelten Linie wurde bereits im Text erklärt.

Zustand

β_z	$m = -2$					$m = -3$			0 00 0-32
	$3d_{-2}/0-20$	$4f_{-2}/0-21$	$4d_{-2}/0-22$	$5f_{-2}/0-23$	$5g_{-2}/0-24$	$4f_{-3}/0-30$	$5g_{-3}/0-31$	$5f_{-3}/0-10$	0-20
$1 \cdot 10^{-4}$	1.103549	1.058502	1.058592	1.037774	1.037777	1.058781	1.037976	1.037972	
$1.5 \cdot 10^{-4}$	1.103947	1.058979	1.058986	1.030164	1.038170	1.059277	1.038468	1.038458	
$2 \cdot 10^{-4}$	1.104345	1.059375	1.059378	1.038550	1.038561	1.059771	1.038956	1.038939	
$3 \cdot 10^{-4}$	1.105139	1.060161	1.060154	1.039309	1.039334	1.060754	1.039924	1.039085	
$5 \cdot 10^{-4}$	1.106720	1.061720	1.061679	1.040780	1.040849	1.062298	1.041320	1.041714	
$7 \cdot 10^{-4}$	1.108292	1.063257	1.063168	1.042188	1.042322	1.064615	1.043667	1.043459	
$1 \cdot 10^{-3}$	1.110631	1.065525	1.065331	1.044186	1.044456	1.067439	1.046344	1.045929	
$1.5 \cdot 10^{-3}$	1.114484	1.069204	1.068759	1.047233	1.047820	1.072014	1.050578	1.049682	
$2 \cdot 10^{-3}$	1.118278	1.072760	1.071976	1.049963	1.050965	1.076431	1.054555	1.053040	
$3 \cdot 10^{-3}$	1.125695	1.079533	1.077829	1.053882	1.056691	1.084827	1.061059	1.058805	
$5 \cdot 10^{-3}$	1.139880	1.091899	1.087621	1.061720	1.066442	1.100157	1.074558	1.067712	
$7 \cdot 10^{-3}$	1.153277	1.103014	1.095500	1.066833	1.074626	1.113989	1.085538	1.074406	
$1 \cdot 10^{-2}$	1.172109 (.005)	1.117965	1.104834	1.072214	1.084991	1.132745	1.099947	1.081929	
$1.5 \cdot 10^{-2}$	1.200820	1.139720	1.116122	1.077453	1.099040	1.160430	1.120518	1.090410	
$2 \cdot 10^{-2}$	1.227008 (.03)	1.158815	1.123995	1.079795	1.110519	1.185184	1.138365	1.095756	
$3 \cdot 10^{-2}$	1.274125	1.191922	1.133505		1.128746	1.229127	1.169070	1.100811	
$5 \cdot 10^{-2}$	1.355157 (.19)	1.246117	1.138294		1.154236	1.304030	1.218977		
$7 \cdot 10^{-2}$	1.425356	1.290763			1.171079	1.368717	1.259857		
$1 \cdot 10^{-1}$	1.517830 (.55)	1.346526			1.186166	1.453866	1.310611		
$1.5 \cdot 10^{-1}$	1.649477	1.419731			1.193233	1.575026	1.376530		
$2 \cdot 10^{-1}$	1.761955 (1.3)	1.475938				1.678433	1.426278		
$3 \cdot 10^{-1}$	1.948585	1.553950				1.849552	1.492868		
$5 \cdot 10^{-1}$	2.227084 (4.5)	1.701154	1.571092	1.499918	1.460712	2.102977	1.543333	1.553098	
$7 \cdot 10^{-1}$	2.429693	1.932795	1.784708	1.705625	1.663331	2.284914		1.769231	XXXXXX
1	2.687204	2.208208	2.039790	1.951920	1.906412	2.563040	2.174590	2.045680	
2	3.547819	2.843305	2.632372	2.526394		3.385420	2.808229	2.730066	
5	5.067033	3.922064	3.653159	3.521533		4.830622		3.955656	
$1 \cdot 10^1$	6.577203	4.956040	4.646432	4.494346	4.432563	6.284834		5.191084	
$2 \cdot 10^1$	8.469501	6.214324	5.870373	5.697095	5.632837	8.099054	6.186388	6.757937	
$5 \cdot 10^1$	11.68024	8.285966	7.910398	7.708242	7.642764	11.18190		9.453750	
$1 \cdot 10^2$	14.74627	10.21548	9.827541	9.603140		14.13051		12.06235	
$2 \cdot 10^2$	18.45269	12.50639	12.11526	11.86860		17.70032		15.25098	
$5 \cdot 10^2$	24.47945	16.16695	15.78268			23.51568		20.50035	
$1 \cdot 10^3$	30.00008	19.47179	19.09842			28.85272		25.36418	

Tabelle 8: Gesamtenergien in Einheiten von $-E_z$ der 5 tiefsten $m = -2$ und der 3 tiefsten $m = -3$ Zustände im Bereich $10^{-4} \leq \beta_z \leq 10^3$ für Fe XXV ($Z=26$) bei 1-Konfigurationsrechnung. Die Bedeutung der durchgezogenen und gestrichelten Linien wie in Tabelle 7. Die durch Kreuze markierte Linie in der letzten Spalte kennzeichnet den Bereich von β_z , in dem der Intruder $2p_{-1}3d_{-2}/0-10$ den Zustand $1s5f_{-3}/0 00 0-32$ schneidet. Oberhalb dieser Linie sind die Energien des Zustandes 0 00 0-32 und unterhalb die des Zustandes 0-10 0-20 angegeben.

Zustand

β_z	$m = 0$				$m = -1$				
	$2p_0/001$	$2s_0/002$	$3p_0/003$	$3s_0/004$	$2p_{-1}/0-10$	$3d_{-1}/0-11$	$3p_{-1}/0-12$	$4d_{-1}/0-13$	$4p_{-1}/0-14$
$1 \cdot 10^{-4}$	1.218862	1.224020	1.097027	1.098448	1.219062	1.096438	1.097226	1.054505	1.054827
$1.5 \cdot 10^{-4}$	1.219062	1.224220	1.097226	1.098646	1.219362	1.096737	1.097524	1.054801	1.055120
$2 \cdot 10^{-4}$	1.219262	1.224419	1.097424	1.098843	1.219661	1.097035	1.097821	1.055095	1.055410
$3 \cdot 10^{-4}$	1.219661	1.224818	1.097820	1.099235	1.220260	1.097631	1.098413	1.055678	1.055983
$5 \cdot 10^{-4}$	1.220458	1.225612	1.098606	1.100010	1.221455	1.098817	1.099586	1.056825	1.057095
$7 \cdot 10^{-4}$	1.221255	1.226405	1.099386	1.100773	1.222648	1.099997	1.100746	1.057945	1.058163
$1 \cdot 10^{-3}$	1.222447	1.227588	1.100544	1.101894	1.224433	1.101753	1.102462	1.059575	<u>1.059686</u>
$1.5 \cdot 10^{-3}$	1.224427	1.229548	1.102439	1.103701	1.227397	1.104647	1.105255	1.062163	1.062391
$2 \cdot 10^{-3}$	1.226400	1.231491	1.104292	1.105432	1.230346	1.107498	1.107968	1.064597	1.065009
$3 \cdot 10^{-3}$	1.230323	1.235330	1.107877	1.108670	1.236202	1.113077	1.113155	1.069032	1.069950
$5 \cdot 10^{-3}$	1.238075	1.242815	1.114568	<u>1.114290</u>	1.247740	1.123758	1.122630	1.076431	1.078801
$7 \cdot 10^{-3}$	1.245705	1.250046	1.120658	1.120475	1.259053	1.133850	1.131025	1.082302	1.086545
$1 \cdot 10^{-2}$	1.256923	1.260428	1.128779	1.129200	1.275609	1.148018	1.141908	1.089070	1.096623
$1.5 \cdot 10^{-2}$	1.275031	1.276541	1.140028	1.141884	1.302157	1.169514	1.156491	1.096733	1.110572
$2 \cdot 10^{-2}$	1.292435	1.291264	1.149000	1.152701	1.327503	1.188955	1.167794	1.101460	1.122107
$3 \cdot 10^{-2}$	1.325301	1.317011	1.161972	1.170277	1.375069	1.223438	1.183776	1.105487	1.140541
$5 \cdot 10^{-2}$	1.384439	1.356556	1.175135	1.194818	1.460437	1.281091	1.199797		1.166375
$7 \cdot 10^{-2}$	1.436596	1.384092	1.177787	1.210358	1.536315	1.329269	1.203304		1.183375
$1 \cdot 10^{-1}$	1.504946	1.409218		1.222716	1.637624	1.390118			1.198422
$1.5 \cdot 10^{-1}$	1.599537	1.421025		1.223680	1.783258	1.471208			1.204927
$2 \cdot 10^{-1}$	1.676529				1.908505	1.534723			
$3 \cdot 10^{-1}$	1.793882				2.117696	<u>1.626174</u>			
$5 \cdot 10^{-1}$	<u>1.935893</u>	1.629064	1.520903	1.474087	2.433566	1.731164	1.582676	1.502496	1.461593
$7 \cdot 10^{-1}$	2.058344	1.842257	1.725038	1.675919	2.667383	1.962276	1.795594	1.707363	1.663740
1	2.332992	2.096510	1.965903	1.918130	<u>2.926330</u>	2.236545	2.049775	1.952693	1.906307
2	2.961213	2.868507	2.540056	2.484967	3.801037	2.867077	2.640198	2.525125	2.420917
5	4.020369	3.702364	3.529582	3.471176	5.415593	3.935110	3.657498	3.517344	3.461042
$1 \cdot 10^1$	5.033256	4.691171	4.498132	4.438508	7.015637	4.958019	4.647840	4.487921	4.429142
$2 \cdot 10^1$	6.267564	5.910327	5.696860	5.637180	9.014852	6.203669	5.868754	5.688528	5.628515
$5 \cdot 10^1$	8.307710	7.943838	7.703399	7.645144	12.39510	8.258392	7.904777	7.697242	7.637345
$1 \cdot 10^2$	10.21645	9.856032	9.595506	9.539187	15.61152	10.17650	9.818934	9.590594	9.531993
$2 \cdot 10^2$	12.49058	12.13887	11.85880	11.80489	19.48740	12.45808	12.10375	11.85483	11.79826
$5 \cdot 10^2$	16.13529	15.80004	15.49533	15.44496	25.76614	16.10981	15.76749	15.49223	15.43902
$1 \cdot 10^3$	19.43219	19.11124	18.78892	18.74136	31.49662	19.41033	19.08059	18.78633	18.73588

Tabelle 9: Gesamtenergien analog Tabelle 7 für Si XIII ($Z=14$).

Zustand								
B_z	$m = -2$				$m = -3$			
	$3d_{-2}/0-20$	$4f_{-2}/0-21$	$4d_{-2}/0-22$	$5f_{-2}/0-23$	$5d_{-2}/5g_{-2}/0-24$	$4f_{-3}/0-30$	$5g_{-3}/0-31$	$5f_{-3}/0-10\ 0-20\ 0-32$
$1\ 10^{-4}$	1.096637	1.054688	1.054704	1.035281	<u>1.035287</u>	1.054887	1.035483	1.035478
$1.5\ 10^{-4}$	1.097034	1.055084	1.055097	1.035670	1.035677	1.055382	1.035974	1.035964
$2\ 10^{-4}$	1.097433	1.055479	1.055489	1.036055	1.036067	1.055876	1.036462	1.036444
$3\ 10^{-4}$	1.098227	1.056265	1.056263	1.036812	1.036838	1.056857	1.037427	1.037386
$5\ 10^{-4}$	1.099807	1.057821	1.057783	1.038273	1.038347	1.058797	1.039316	1.039202
$7\ 10^{-4}$	1.101376	1.059354	1.059264	1.039668	1.039811	1.060709	1.041152	1.040930
$1\ 10^{-3}$	1.103712	1.061612	1.061411	1.041639	1.041927	1.063521	1.043808	1.043365
$1.5\ 10^{-3}$	1.107554	1.065269	1.064800	1.044626	1.045250	1.068066	1.047993	1.047042
$2\ 10^{-3}$	1.111333	1.068796	1.067966	1.047283	1.048344	1.072444	1.051910	1.050310
$3\ 10^{-3}$	1.118711	1.075492	1.073691	1.051792	1.053950	1.080743	1.059078	1.055881
$5\ 10^{-3}$	1.132780	1.087659	1.083172	1.058537	1.063437	1.095831	1.071485	1.064404
$7\ 10^{-3}$	1.146025	1.098551	1.090718	1.063335	1.071363	1.109402	1.082185	1.070749
$1\ 10^{-2}$	1.164589	1.113161	1.099585	1.068293	1.081368	1.127768	1.096209	1.077811
$1.5\ 10^{-2}$	1.192812	1.134375	1.110170	1.072927	1.094886	1.154856	1.116214	1.085634
$2\ 10^{-2}$	1.218508	1.152973	1.117429	1.074748	1.105899	1.179056	1.133567	1.090418
$3\ 10^{-2}$	1.264693	1.185201	1.125893		1.123324	1.222039	1.163425	1.094513
$5\ 10^{-2}$	1.344102	1.237943	1.129023		1.147514	1.295366	1.211962	
$7\ 10^{-2}$	1.412926	1.281382			1.163290	1.358752	1.251719	
$1\ 10^{-1}$	1.503647	1.335612			1.177024	1.442253	1.301051	
$1.5\ 10^{-1}$	1.632887	1.406704			1.182224	1.561148	1.365009	
$2\ 10^{-1}$	1.743353	1.461133				1.662655	1.413107	
$3\ 10^{-1}$	1.926642	<u>1.536184</u>				1.830610	1.476934	
$5\ 10^{-1}$	2.199889	1.685059	1.560308	1.492252	1.455087	2.079058	1.523031	1.542427
$7\ 10^{-1}$	<u>2.398244</u>	1.914693	1.772917	1.697399	1.657371	<u>2.256968</u>		1.758290 xxxxxxx 2.017574
1	2.655944	2.187873	2.026894	1.943099	1.900101	2.534676	2.156067	2.692070
2	3.505599	2.817945	2.617263	2.516433		3.347034	2.784966	3.899617
5	5.004853	3.889093	3.635062	3.510125		4.781916		
$1\ 10^1$	6.494583	4.916991	4.626091	4.481983	4.424223	6.209288		5.116526
$2\ 10^1$	8.360620	6.169224	5.847868	5.683829	5.623978	7.999207	6.143844	6.659527
$5\ 10^1$	11.52555	8.233522	7.885193	7.693971	7.633288	11.03945		9.313594
$1\ 10^2$	14.54674	10.15837	9.800404	9.588265		13.94614		11.88118
$2\ 10^2$	18.19787	12.44557	12.08630	11.85325		17.46404		15.01906
$5\ 10^2$	24.13293	16.10270	15.75147			23.19283		20.18387
$1\ 10^3$	29.56817	19.40591	19.06563			28.44884		24.96859

Tabelle 10: Gesamtenergien analog Tabelle 8 für Si XIII ($Z=14$).

Zustand

	$m = 0$				$m = -1$			
	$2p_0/001$	$2s_0/002$	$3p_0/003$	$\frac{3s_0}{3d_0}/004$	$2p_{-1}/0-10$	$3d_{-1}/0-11$	$3p_{-1}/0-12$	$\frac{4p_{-1}}{4f_{-1}}/0-14$
$1 \cdot 10^{-4}$	1.196180	1.204862	1.086719	1.089085	1.196380	1.085712	1.086918	1.048472
$1.5 \cdot 10^{-4}$	1.196380	1.205062	1.086918	1.089283	1.196680	1.086011	1.087216	1.048259
$2 \cdot 10^{-4}$	1.196580	1.205261	1.087116	1.089480	1.196979	1.086309	1.087513	1.049061
$3 \cdot 10^{-4}$	1.196979	1.205659	1.087512	1.089871	1.197578	1.086904	1.088103	1.049642
$5 \cdot 10^{-4}$	1.197776	1.206454	1.088297	1.090644	1.198773	1.088089	1.089274	1.050781
$7 \cdot 10^{-4}$	1.198572	1.207246	1.089074	1.091404	1.199965	1.089266	1.090430	1.051891
$1 \cdot 10^{-3}$	1.199764	1.208428	1.090227	1.092518	1.201749	1.091017	1.092136	1.053501
$1.5 \cdot 10^{-3}$	1.201742	1.210385	1.092111	1.094309	1.204709	1.093898	1.094907	1.056291
$2 \cdot 10^{-3}$	1.203713	1.212325	1.093949	1.096018	1.207654	1.096732	1.097588	1.058808
$3 \cdot 10^{-3}$	1.207629	1.216154	1.097489	1.099193	1.213495	1.102261	1.102690	1.062676
$5 \cdot 10^{-3}$	1.215359	1.223607	1.104046	<u>1.104630</u>	1.224991	1.112793	1.111917	1.069656
$7 \cdot 10^{-3}$	1.222957	1.230792	1.109952	1.109375	1.236240	1.122686	1.119993	1.075071
$1 \cdot 10^{-2}$	1.234107	1.241079	1.117734	1.117795	1.252668	1.136496	1.130328	1.081168
$1.5 \cdot 10^{-2}$	1.252058	1.256975	1.128332	1.129871	1.278928	1.157322	1.143947	1.087814
$2 \cdot 10^{-2}$	1.269258	1.271426	1.136620	1.140059	1.303920	1.176073	1.154317	1.091643
$3 \cdot 10^{-2}$	1.301618	1.296527	1.148275	1.156404	1.350668	1.209228	1.168617	1.094133
$5 \cdot 10^{-2}$	1.359553	1.334630	1.159166	1.178732	1.434293	1.264524	1.181917	1.153788
$7 \cdot 10^{-2}$	1.410453	1.360724	1.159950	1.192356	1.508509	1.310682	1.183252	1.168932
$1 \cdot 10^{-1}$	1.476990	1.383812		1.202238	1.607568	1.368934		1.181618
$1.5 \cdot 10^{-1}$	1.568845	1.392566			1.749980	1.446430		
$2 \cdot 10^{-1}$	1.643402				1.872454	1.506924		
$3 \cdot 10^{-1}$	1.756507				2.076904	<u>1.593336</u>		
$5 \cdot 10^{-1}$	<u>1.891505</u>	1.606597	1.506433	1.463520	2.385057	1.701879	1.563737	1.489429
$7 \cdot 10^{-1}$	2.022203	1.818087	1.709797	1.664874	2.612456	1.929541	1.775019	1.693443
1	2.293023	2.070527	1.953470	1.906597	<u>2.863180</u>	2.199878	2.027425	1.937876
2	2.913373	2.657031	2.522572	2.472538	3.730118	2.822045	2.614334	2.508609
5	3.961738	3.668751	3.510387	3.457680	5.311076	3.877995	3.626997	3.498734
$1 \cdot 10^1$	4.966735	4.654105	4.477821	4.424329	6.876725	4.891570	4.613931	4.467887
$2 \cdot 10^1$	6.193857	5.870301	5.675598	5.622352	8.031785	6.128336	5.831577	5.667246
$5 \cdot 10^1$	8.226119	7.900194	7.681141	7.629549	12.13512	8.172894	7.863527	7.674544
$1 \cdot 10^2$	10.13028	9.809856	9.572682	9.523073	15.27639	10.08496	9.774799	9.567120
$2 \cdot 10^2$	12.40098	12.09032	11.83556	11.78830	19.05982	12.36199	12.05689	11.83079
$5 \cdot 10^2$	16.04260	15.74859	15.47171	15.42781	25.18561	16.00980	15.71730	15.46769
$1 \cdot 10^3$	19.33800	19.05774	18.76518	18.72356	30.77404	19.30860	19.02805	18.76157

Tabelle 11: Gesamtenergien analog Tabelle 7 für OVII ($Z=8$).

Zustand								
B_2	$m = -2$				$m = -3$			
	$3d_{-2}/0-20$	$4f_{-2}/0-21$	$4d_{-2}/0-22$	$5f_{-2}/0-23$	$5d_{-2}/0-24$	$4f_{-3}/0-30$	$5g_{-3}/0-31$	$0\ 00\ 0-32$ $5f_{-3}/0-10\ 0-20$
$1\ 10^{-4}$	1.085912	1.048649	1.048670	1.031115	<u>1.031424</u>	1.048848	1.031617	1.031612
$1.5\ 10^{-4}$	1.086301	1.049045	1.049063	1.031803	1.031811	1.049342	1.032007	1.032096
$2\ 10^{-4}$	1.086707	1.049439	1.049453	1.032186	1.032199	1.049635	1.032594	1.032573
$3\ 10^{-4}$	1.087500	1.050224	1.050225	1.032937	1.032967	1.050814	1.033555	1.033508
$5\ 10^{-4}$	1.089077	1.051773	1.051735	1.034382	1.034465	1.052747	1.035430	1.035302
$7\ 10^{-4}$	1.090643	1.053296	1.053200	1.035752	1.035912	1.054647	1.037246	1.036997
$1\ 10^{-3}$	1.092970	1.055539	1.055317	1.037673	1.037994	1.057436	1.039061	1.039360
$1.5\ 10^{-3}$	1.096793	1.059154	1.058635	1.040551	1.041243	1.061928	1.043959	1.042909
$2\ 10^{-3}$	1.100546	1.062627	1.061707	1.043079	1.044244	1.066237	1.047769	1.046620
$3\ 10^{-3}$	1.107851	1.069183	1.067202	1.047303	1.049640	1.074360	1.054699	1.051257
$5\ 10^{-3}$	1.121708	1.081001	1.076142	1.053477	1.058673	1.089326	1.066612	1.059136
$7\ 10^{-3}$	1.134679	1.091508	1.083131	1.057749	1.066171	1.102148	1.076844	1.064905
$1\ 10^{-2}$	1.152772	1.105540	1.091210	1.062016	1.075580	1.119859	1.090228	1.071208
$1.5\ 10^{-2}$	1.180154	1.125851	1.100634	1.065660	1.088223	1.145942	1.109305	1.077958
$2\ 10^{-2}$	1.205017	1.143629	1.106886	1.066629	1.098473	1.169240	1.125850	1.081321
$3\ 10^{-2}$	1.249644	1.174414	1.113639		1.114587	1.210649	1.154323	1.084354
$5\ 10^{-2}$	1.326369	1.224778	1.114057		1.136660	1.281402	1.200630	
$7\ 10^{-2}$	1.392931	1.266248			1.150696	1.342665	1.230558	
$1\ 10^{-1}$	1.480777	1.317978			1.162229	1.423480	1.285576	
$1.5\ 10^{-1}$	1.606080	1.385628			1.164394	1.538686	1.346346	
$2\ 10^{-1}$	1.713262	1.437162				1.637102	1.391759	
$3\ 10^{-1}$	1.891105	<u>1.507381</u>				1.799907	1.451093	
$5\ 10^{-1}$	2.155803	1.659246	1.543152	1.480180	1.446268	2.040259	1.490088	
$7\ 10^{-1}$	<u>2.347237</u>	1.885695	1.754183	1.684467	1.648039	<u>2.211623</u>		1.740894
1	2.605299	2.155213	2.006437	1.929254	1.890235	2.488748	2.126422	1.992983 xxxxxxx
2	3.437222	2.777374	2.593353	2.500838		3.284899	2.747843	2.630497
5	4.904205	3.836780	3.606523	3.492332		4.690171		3.808349
$1\ 10^1$	6.360907	4.855316	4.594197	4.462616	4.411267	6.087114		4.995810
$2\ 10^1$	8.184533	6.098356	5.812551	5.663100	5.610237	7.837302	6.076884	6.500266
$5\ 10^1$	11.27553	8.151713	7.845693	7.671741	7.618609	10.80931		9.086920
$1\ 10^2$	14.22440	10.06977	9.757926	9.565151		13.64841		11.58831
$2\ 10^2$	17.78643	12.35169	12.04100	11.82947		17.08266		14.64436
$5\ 10^2$	23.57379	16.00406	15.70272			22.67204		19.67293
$1\ 10^3$	28.87156	19.30507	19.01444			27.79762		24.33022

Tabelle 12: Gesamtenergien analog Tabelle 8 für OVII ($Z=8$).

Zustand									
β_Z	$m = 0$				$m = -1$				
	$2p_0/001$	$2s_0/002$	$3p_0/003$	$3s_0/004$	$2p_{-1}/0-10$	$3d_{-1}/0-11$	$3p_{-1}/0-12$	$4d_{-1}/0-13$	$4p_{-1}/0-14$
1 10^{-4}	1.066118	1.087525	1.029192	1.034639	1.066318	1.028383	1.029390	1.016218	1.016643
1.5 10^{-4}	1.066318	1.087724	1.029389	1.034834	1.066617	1.028680	1.029683	1.016504	1.016920
2 10^{-4}	1.066517	1.087923	1.029584	1.035028	1.066915	1.028975	1.029974	1.016784	1.017189
3 10^{-4}	1.066915	1.088320	1.029971	1.035409	1.067511	1.029560	1.030547	1.017327	1.017699
5 10^{-4}	1.067708	1.089110	1.030728	1.036151	1.068697	1.030714	1.031662	1.018347	<u>1.018613</u>
7 10^{-4}	1.068497	1.089895	1.031464	1.036863	1.069876	1.031845	1.032736	1.019283	1.019458
1 10^{-3}	1.069674	1.091064	1.032529	1.037877	1.071632	1.033500	1.034270	1.020547	1.020895
1.5 10^{-3}	1.071619	1.092987	1.034204	1.039430	1.074525	1.036153	1.036638	1.022334	1.023065
2 10^{-3}	1.073542	1.094880	1.035758	1.040818	1.077376	1.038681	1.038738	1.023804	1.025004
3 10^{-3}	1.077324	1.098574	1.038543	1.043149	1.082954	1.043415	1.042536	1.026060	1.028369
5 10^{-3}	1.084638	1.105611	1.043051	1.046343	1.093650	1.051864	1.048376	1.028869	1.033754
7 10^{-3}	1.091640	1.112200	1.046503	<u>1.048056</u>	1.103798	1.059343	1.052717	1.030350	1.030838
1 10^{-2}	1.101621	1.121320	1.050323	1.051754	1.118164	1.069341	1.057446	1.031127	1.043220
1.5 10^{-2}	1.117091	1.134752	1.054344	1.058052	1.140341	1.083392	1.062410		1.049836
2 10^{-2}	1.131403	1.146350	1.056496	1.062731	1.160889	1.096730	1.065152		1.054875
3 10^{-2}	1.157473	1.165284	1.057378	1.069034	1.198643	1.119198	1.066592		1.062051
5 10^{-2}	1.202796	1.191055		1.074354	1.265760	1.156543			1.069565
7 10^{-2}	1.242104	1.205693			1.325790	1.187735			1.071479
1 10^{-1}	1.293285	1.213276			1.406878	1.227014			
1.5 10^{-1}	1.363529				1.524887	1.278548			
2 10^{-1}	1.419698				1.627019	1.317387			
3 10^{-1}	1.501664				1.797380	<u>1.367915</u>			
5 10^{-1}	<u>1.586401</u>	1.466975	1.420246	1.401688	2.050773	1.513048	1.447610	1.411034	1.397173
7 10^{-1}	1.783255	1.669039	1.619575	1.600590	<u>2.232898</u>	1.720237	1.649877	1.611378	1.596216
1	2.030449	1.911572	1.859132	1.839816	2.467513	1.967755	1.892643	1.851177	1.835585
2	2.603700	2.479282	2.420778	2.401215	3.239397	2.543299	2.460815	2.413333	2.378957
5	3.591614	3.467173	3.400032	3.380970	4.589940	3.536891	3.449255	3.393334	3.377294
1 10^1	4.556043	4.436167	4.362121	4.343978	5.920577	4.506673	4.418600	4.356025	4.340493
2 10^1	5.749506	5.636690	5.555612	5.538689	7.574957	5.705596	5.619428	5.550116	5.535373
5 10^1	7.749139	7.647293	7.557075	7.541956	10.35671	7.711842	7.630406	7.552321	7.538837
1 10^2	9.636980	9.543374	9.446581	9.432803	12.99041	9.603891	9.526776	9.442323	9.429820
2 10^2	11.89702	11.81108	11.70812	11.69558	16.15163	11.86749	11.79479	11.70430	11.69273
5 10^2	15.53066	15.45368	15.34327	15.33018	21.25212	15.50499	15.43785	15.33993	15.32948
1 10^3	18.82296	18.75185	18.63635	18.62414	25.89174	18.79972	18.73641	18.63332	18.62362

Tabelle 13: Gesamtenergien analog Tabelle 7 für He I ($Z=2$).

Zustand

β_z	$m = -2$					$m = -3$			$0 \ 00 \ 0-32$ $0-10 \ 0-20$
	$3d_{-2}/0-20$	$4f_{-2}/0-21$	$4d_{-2}/0-22$	$5f_{-2}/0-23$	$5g_{-2}/0-24$	$4f_{-3}/0-30$	$5g_{-3}/0-31$	$5f_{-3}$	
$1 \ 10^{-4}$	1.028882	1.016415	1.016413	1.010770	1.010780	1.016612	1.010976		1.010960
$5 \ 10^{-4}$	1.028976	1.016803	1.016791	1.011133	1.011156	1.017096	1.011446		1.011411
$2 \ 10^{-4}$	1.029369	1.017187	1.017161	1.011481	1.011522	1.017574	1.011905		1.011842
$3 \ 10^{-4}$	1.030147	1.017939	1.017876	1.012137	1.012226	1.018511	1.012789		1.012652
$5 \ 10^{-4}$	1.031678	1.019389	1.019209	1.013297	1.013532	1.020312	1.014435		1.014080
$7 \ 10^{-4}$	1.033176	1.020770	1.020423	1.014287	1.014718	1.022024	1.015943		1.015299
$1 \ 10^{-3}$	1.035361	1.022723	1.022048	1.015526	1.016316	1.024444	1.017998		1.016036
$1.5 \ 10^{-3}$	1.038850	1.025714	1.024334	1.017122	1.018619	1.028153	1.021023		1.018864
$2 \ 10^{-3}$	1.042166	1.028440	1.026221	1.018322	1.020602	1.031547	1.023699		1.020445
$3 \ 10^{-3}$	1.048362	1.033313	1.029173	1.019974	1.023940	1.037670	1.028375		1.022801
$5 \ 10^{-3}$	1.059447	1.041580	1.033105	1.021583	1.029139	1.048255	1.036152		1.025659
$7 \ 10^{-3}$	1.069347	1.048656	1.035538	1.021932	1.033214	1.057527	1.042739		1.027155
$1 \ 10^{-2}$	1.002761 (.036)	1.057937	1.037575		1.038109	1.069981	1.051334		1.027947
$1.5 \ 10^{-2}$	1.102693	1.071255	1.038442		1.044334	1.088411	1.063627		
$2 \ 10^{-2}$	1.120695 (.12)	1.082901			1.049070	1.105040	1.074356		
$3 \ 10^{-2}$	1.153132	1.103133			1.055817	1.135021	1.092964		
$5 \ 10^{-2}$	1.209702 (.46)	1.136422			1.062885	1.187352	1.123486		
$7 \ 10^{-2}$	1.259648	1.163879			1.064660	1.233536	1.148524		
$1 \ 10^{-1}$	1.326604 (1.0)	1.197894				1.295329	1.179261		
$1.5 \ 10^{-1}$	1.423571	1.241210				1.384478	1.217633		
$2 \ 10^{-1}$	1.507284 (2.1)	1.272324				1.461005	1.244194		
$3 \ 10^{-1}$	1.646441	<u>1.308503</u>				1.587627	1.271992		
$5 \ 10^{-1}$	1.850782	1.493702	1.438048	1.408373	1.394764	1.771071			
$7 \ 10^{-1}$	<u>1.993526</u> (6.2)	1.701195	1.640345	1.608109	1.593875	<u>1.896485</u>			1.634840
1	2.257230	1.949328	1.883178	1.848132	1.833318	2.174382	1.938918		1.877701
2	2.968309	2.526865	2.451562	2.410773		2.860499	2.517499		2.446193
5	4.216099	3.524231	3.440393	3.391465		4.065392			3.435240
$1 \ 10^1$	5.449238	4.497132	4.410084	4.354651	4.338712	5.257071			4.567643
$2 \ 10^1$	6.986673	5.698889	5.611287	5.549167	5.533728	6.743890	5.695484		5.410624 xxxxxxx
$5 \ 10^1$	9.580601	7.708030	7.622788	7.551786	7.537361	9.254668			7.541388
$1 \ 10^2$	12.04487	9.601520	9.519571			11.64215			9.596808
$2 \ 10^2$	15.01167	11.86608	11.78801	11.70410		14.51096			12.10357
$5 \ 10^2$	19.31549	15.50431	15.43163			19.18203			16.22009
$1 \ 10^3$	24.20044	18.79933	18.73061			23.44321			20.02917

Tabelle 14: Gesamtenergien analog Tabelle 8 für He I ($Z=2$).

aufgeführt, um wieviel Prozent eine 2-Konfigurationsrechnung tiefer liegt (bezogen auf das 2-Konfigurationsergebnis). Eine genaue Untersuchung des Einflusses von Konfigurationsmischungen wird in Abschnitt V.2. durchgeführt.

In Tabelle 15 sind die Gesamtenergien von H^- der DTB Zustände mit $m = -1, -2$ und -3 im Bereich von $10^{-4} \leq \beta_z \leq 10^3$ angegeben. Weiterhin sind in dieser Tabelle für den $m = -1$ Zustand die Ergebnisse einer 2-Konfigurationsrechnung und die Ionisierungsenergien der 1- und der 2-Konfigurationsrechnungen aufgeschrieben (die Ergebnisse der 1-Konfigurationsrechnungen sind bezogen auf 1-Konfigurations-Wasserstoffwerte und die der 2-Konfigurationsrechnungen auf die von W. Rösner [10] mit einem 12-Konfigurationsansatz berechneten Werte, im folgenden als beste Wasserstoffwerte bezeichnet). In Klammern ist für einige β_z -Werte angegeben, um wieviel Prozent das Ergebnis des 2-Konfigurationsansatzes tiefer liegt als das des 1-Konfigurationsansatzes (bezogen auf das 2-Konfigurationsergebnis).

Für das H^- -Ion im Magnetfeld konnten durch einen Variationsansatz nur gebundene Triplettzustände (im feldfreien Fall existiert kein solcher) mit gerader z -Parität und $m < 0$ gefunden werden [26]. Das Problem, ob mehr als ein gebundener Zustand bei gegebenem m existiert, kann hier nicht beantwortet werden. Die Frage, ob

welcher Magnetfeldstärke der $m = -1$ Triplettzustand zuerst bindet, wurde von [25] beantwortet, wo beim Übergang $\beta \rightarrow 0$ gezeigt wird, daß mindestens ein gebundener Zustand existiert, so daß der tiefste $m = -1$ Zustand bereits bei unendlich kleinem Magnetfeld bindet. Die durch das Magnetfeld hervorgerufene Bindung der Zustände kann durch ein Zusammenwirken des Einschlusses durch das Magnetfeld in der x-y-Ebene und einer Bindung in der z-Richtung durch ein eindimensionales, anziehendes, effektives Potential verstanden werden [26]. Eindimensionale, anziehende Potentiale besitzen immer mindestens einen gebundenen Zustand gerader Parität. Die Zuordnung der tiefsten DTB Zustände mit $m \leq -1$ verläuft für das H^- -Ion analog zu der in Abschnitt I.4. angegebenen Vorschrift.

Mit einem 1-Konfigurationsansatz auf der sphärischen Seite erhält man für das H^- -Ion keinen gebundenen Triplettzustand. Die Hinzunahme eines höheren Drehimpulses ($l_2 = 3$) zur Konfiguration $1s2p_{-1} (l_2 = 1)$ liefert im Bereich von $0.09 \lesssim \beta_z \lesssim 0.9$ einen gebundenen Triplettzustand mit $m = -1$, während im übrigen Bereich kein solcher gefunden werden kann. Die Hinzunahme noch höherer Drehimpulse ($l_2 > 3$) und genauere Berechnung der elektrostatischen Elektron-Elektron Wechselwirkung durch Hinzumischen weiterer Konfigurationen mit gleichem Gesamtdrehimpuls sollten für das H^- -Ion im gesamten β_z -Bereich der sphärischen Seite gebundene Zustände liefern.

Zustand						
β_z	1K				$E_I(2p_{-1}/0-10)$	
	$2p_{-1}/0-10$	$3d_{-2}/0-20$	$4f_{-3}/0-30$	$2p_{-1} (2K)$	1K	2K
1 10^{-4}	1.0001528	1.0001519	1.0001515		-0.00047	
1.5 10^{-4}	1.0002291	1.0002278	1.0002272			
2 10^{-4}	1.0003055	1.0003038	1.0003029		-0.00094	
3 10^{-4}	1.0004582	1.0004556	1.0004542			
5 10^{-4}	1.0007636	1.0007591	1.0007569		-0.000236	
7 10^{-4}	1.0010688	1.0010625	1.0010593			
1 10^{-3}	1.0015266	1.0015173	1.0015127		-0.000461	
1.5 10^{-3}	1.0022893	1.0022744	1.0022676			
2 10^{-3}	1.0030466	1.0030305	1.0030214		-0.000945	
3 10^{-3}	1.0045766	1.0045398	1.0045262			
5 10^{-3}	1.0076282	1.0075467	1.0075236		-0.002322	
7 10^{-3}	1.0106858	1.0105380	1.0105051			
1 10^{-2}	1.0152899	1.0149964	1.0149474	1.0176483 (.232)	-0.004510	-0.002152
1.5 10^{-2}	1.0230269	1.0223534	1.0222718	1.0264978 (.338)		
2 10^{-2}	1.0308585	1.0296218	1.0294976	1.0353902 (.438)	-0.008343	-0.003811
3 10^{-2}	1.0468294	1.0439077	1.0436572	1.0533283		
5 10^{-2}	1.0798648	1.0715523	1.0708418	1.0897692 (.909)	-0.015179	-0.005284
7 10^{-2}	1.1137596	1.0980490	1.0965804	1.1266006 (1.14)		-0.003795
1 10^{-1}	1.1645216	1.1357480	1.1326499	1.1814147 (1.43)	-0.016113	+0.000652
1.5 10^{-1}	1.2448496	1.1933107	1.1866111	1.2685259 (1.87)		
2 10^{-1}	1.3174515	1.2446382	1.2338000	1.3483684 (2.29)	-0.010477	+0.019158
3 10^{-1}	1.4401505	1.3308791	1.3115099	1.4868432		
5 10^{-1}	1.6188115	<u>1.4534927</u>	<u>1.4185237</u>	1.7003348 (4.80)	-0.028869	+0.037997
7 10^{-1}	<u>1.7397581</u>	1.587055	1.5550 ^a	1.8585898 (6.39)		+0.026259
1	1.995964	1.828723	1.7923 ^a	2.0322062 (12.6)	-0.04846	-0.012222
2	2.607165	2.395885	2.3486 ^a	2.3250169 (16.5)	+0.04557	
5	3.669310	3.389708	3.3197 ^a		+0.17374	
1 10^1	4.709163	4.365121	4.2745 ^a		+0.27874	
2 10^1	5.995322	5.576044	5.4594 ^a		+0.39542	
5 10^1	8.145986	7.608737	7.4482 ^a		+0.56789	
1 10^2	10.17240	9.530427	9.3222 ^a		+0.71930	
2 10^2	12.59597	11.83428	11.572 ^a		+0.89367	
5 10^2	16.49214	15.54685	15.37259		+1.16804	
1 10^3	20.02577	18.92268	18.70656		+1.41681	

a: Energien berechnet mit den Entwicklungskoeffizienten E_i^{ex} $i=0,3$ der Tabelle 16c

Tabelle 15: Gesamtenergien der 3 DTB Zustände mit $m=-1,-2$ und -3 im Bereich von $10^{-4} \leq \beta_z \leq 10^3$ für das H^- -Ion ($Z=1$) bei 1-Konfigurationsrechnung. Weiterhin sind für einige Werte von β_z für den $m=-1$ Zustand die Ergebnisse einer 2-Konfigurationsrechnung und seine Ionisierungsenergien berechnet aus den 1- und 2-Konfigurationsergebnissen angegeben. Die Bedeutung der durchgezogenen Linie ist wie in Tabelle 7.

Auf der zylindrischen Seite erhält man für $\beta_Z \geq 1.5$ einen gebundenen Zustand mit $m = -1$, wobei die Ionisierungsenergien bezogen auf die besten Wasserstoffwerte berechnet wurden. Zur Verbesserung der Werte für die Ionisierungsenergien muß auch hier eine Multikonfigurationsrechnung durchgeführt werden.

Das Bild 13 zeigt den Verlauf der Energien der DTB Zustände mit $m = -1, -2$ und -3 für die Kernladungszahlen $Z = 26, 2$ und 1 in Abhängigkeit von β_Z im Bereich $10^{-3} \leq \beta_Z \leq 10^3$. Um einen besseren Einblick in die Energieverläufe für schwache Magnetfelder ($10^{-3} \leq \beta_Z \leq 10^{-1}$) und im Zwischenbereich ($10^{-1} \leq \beta_Z \leq 2$) zu gewinnen, sind diese beiden Bereiche in den Bildern 14 und 15 vergrößert herausgezeichnet worden.

Bild 15 zeigt deutlich, daß die Verläufe der in kugelsymmetrischer und der in zylindersymmetrischer Basis berechneten Energien nicht mit stetiger Ableitung zusammengesetzt werden können. Der β_Z -Wert, an dem sich die beiden Methoden überschneiden, wird mit zunehmender magnetischer Quantenzahl m und abnehmender Kernladungszahl Z kleiner.

Die $\frac{1}{Z}$ -Entwicklung für das Zweielektronensystem im Magnetfeld.

Um einen Eindruck von der Z -Abhängigkeit der Energien dieser Zustände zu vermitteln, wird im folgenden die

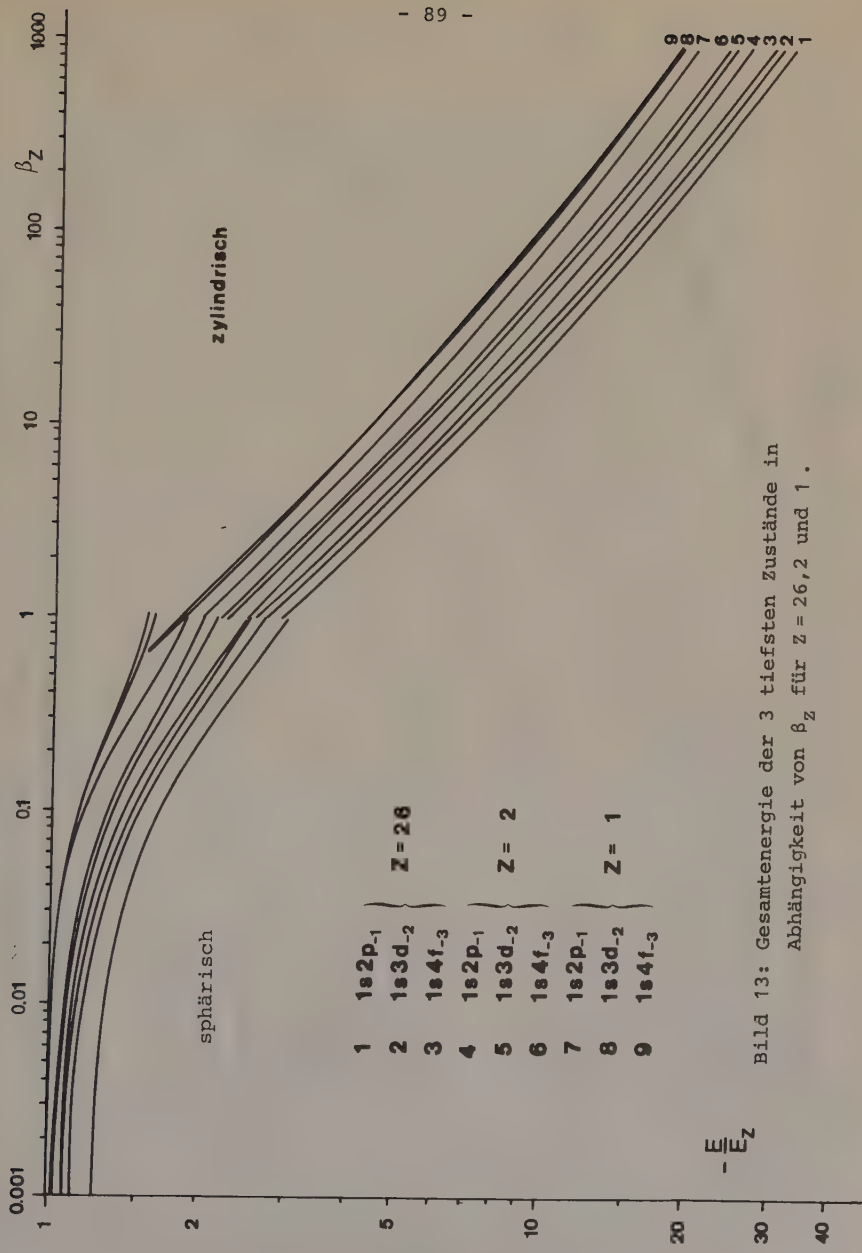


Bild 13: Gesamtenergie der 3 tiefsten Zustände in Abhängigkeit von β_Z für $Z = 26, 2$ und 1 .

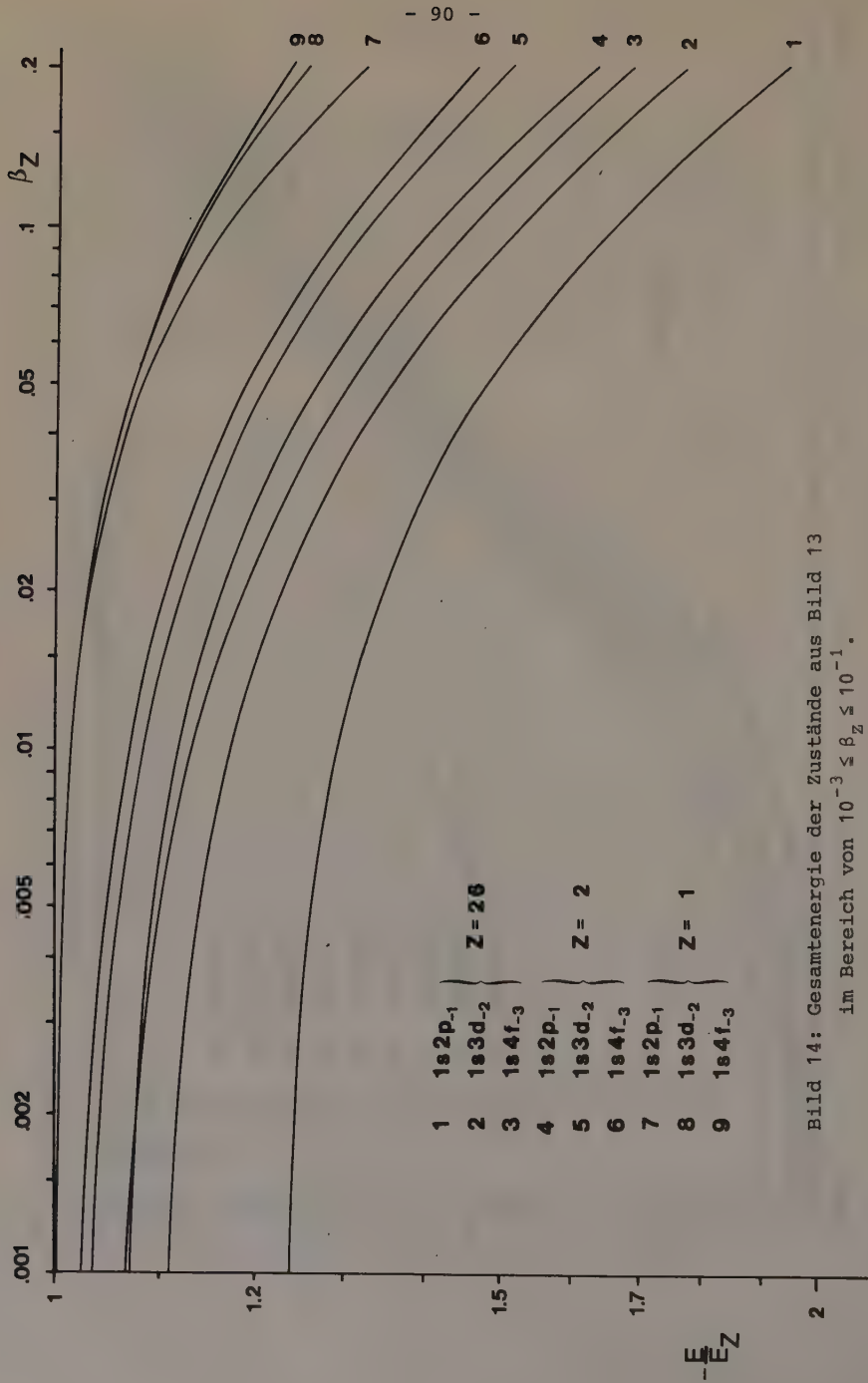


Bild 14: Gesamtenergie der Zustände aus Bild 13
 im Bereich von $10^{-3} \leq \beta_Z \leq 10^{-1}$.

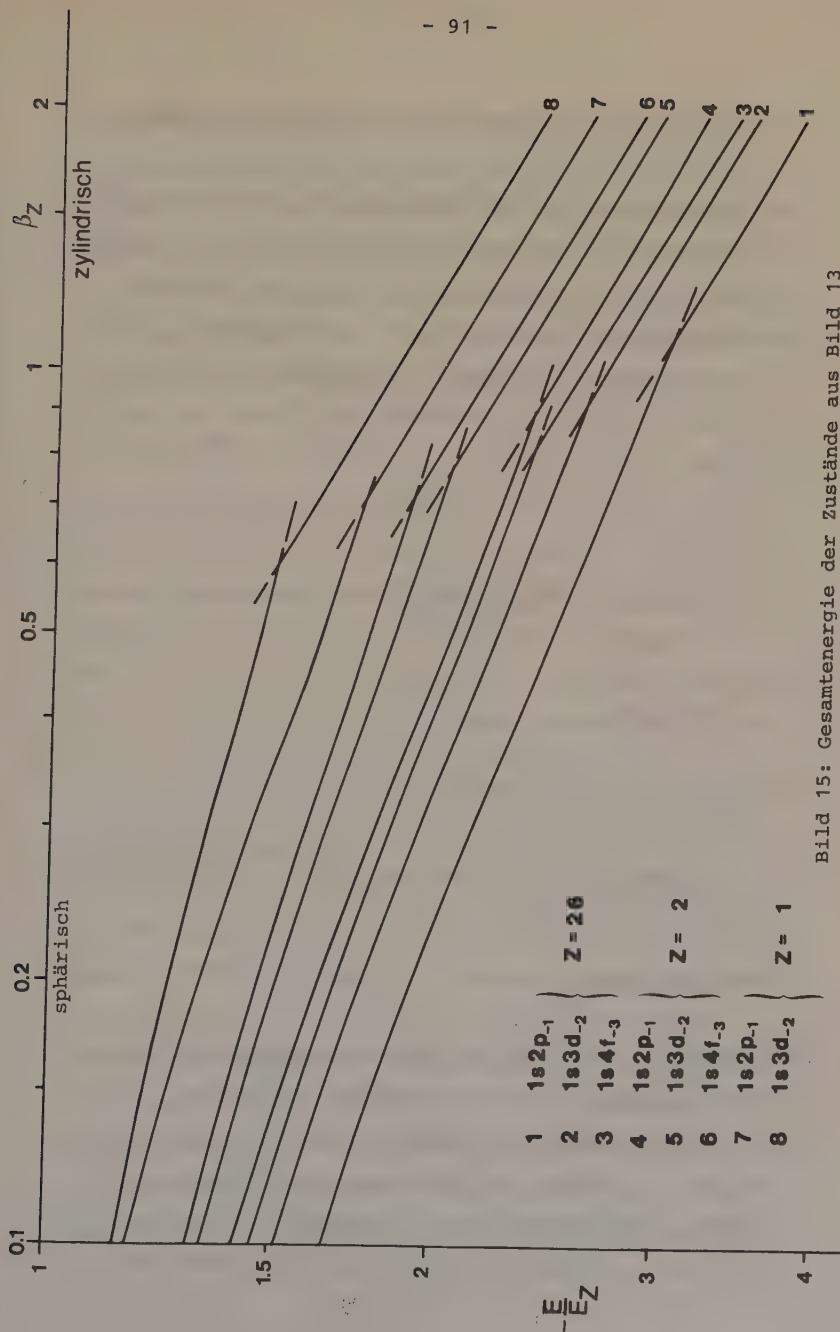


Bild 15: Gesamtenergie der Zustände aus Bild 13
im Bereich von $10^{-1} \leq \beta_Z \leq 2$.

Methode der $\frac{1}{Z}$ -Entwicklung auf diese Zustände angewendet [27,19].

Der Ausgangspunkt der Überlegungen ist der nichtrelativistische Hamiltonoperator mit Magnetfeld (II.3). Wählt man die Energien in Einheiten von $2E_Z$, die Längen in Einheiten von $a_Z = r_B/Z$ und drückt das Magnetfeld durch β_Z aus, so werden die Einteilchenoperatoren der Schrödingergleichung $H\Psi = E\Psi$ unabhängig von Z , und sie läßt sich wie folgt schreiben:

$$(H_0 + \frac{1}{Z}H_1)\Psi = E\Psi \quad (V.1)$$

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{1}{r_i} + \frac{1}{2}\beta_Z^2 r_i^2 \sin^2 \theta_i \right] + \beta_Z (L_Z + 2S_Z) \quad (V.2)$$

$$H_1 = \frac{1}{Z} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (V.3)$$

Faßt man H_1 als Störoperator auf, so läßt sich mit den Methoden der Störungsrechnung eine Entwicklung von E (und Ψ , die hier nicht betrachtet wird) nach dem Störparameter $\frac{1}{Z}$ durchführen.

$$E = E_0 + \frac{1}{Z}E_1 + \frac{1}{Z^2}E_2 + \frac{1}{Z^3}E_3 + \dots \quad (V.4)$$

Dabei ist E_0 die Summe der Einelektronenenergien ohne elektrostatische Elektron-Elektron Korrelation.

Für einige Werte von β_Z wurden für die tiefsten Zustände mit $m = -1, -2$ und -3 die Entwicklungskoeffizienten E_0 , E_1 und E_2 der Energie mit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate aus den berechneten Hartree-Fock Energien

bestimmt und in Tabelle 16 angegeben.

Um einen Eindruck von der Güte der Koeffizienten zu bekommen, sind die "exakten" $E_0^{\text{ex}} = E(\frac{1}{Z} = 0, \beta_Z)$ Werte (1-Konfigurationsansatz) und ihre prozentuale Abweichung vom Ergebnis des Least-Square-Root Fit aufgeführt. In einem weiteren Schritt wurden die Koeffizienten E_1 und E_2 wie folgt verbessert. Aus (V.4) erhält man:

$$E_1 + \frac{1}{Z}E_2 + \frac{1}{Z^2}E_3 = Z(E - E_0) \quad (V.5)$$

In diese Gleichung wurde für E_0 der Wert E_0^{ex} eingesetzt und anschließend wieder mit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate die Koeffizienten $E_i^{\text{ex}} = E_i$ $i = 1, 2, 3$ bestimmt, die ebenfalls in Tabelle 16 angegeben sind.

Im Limes $\beta_Z \rightarrow 0$ muß der Koeffizient E_1 gegen den exakten Wert für $\beta_Z = 0$ von $\frac{2962}{6561} = 0.4514556$ konvergieren. E_1 bei $\beta_Z = 10^{-4}$ liegt um 9.0% zu tief, während E_1^{ex} nur noch um 0.037% zu tief liegt, so daß an diesem Fall die ausgezeichnete Verbesserung des Koeffizienten E_1 , der die Elektron-Elektron Korrelation berücksichtigt, durch die erklärte Methode verdeutlicht werden kann. In Bild 16 sind für einige β_Z -Werte die Verläufe der Gesamtenergien dieser 3 Zustände in Abhängigkeit von $\frac{1}{Z}$ aufgetragen. Für den DTB Zustand $m = -1$ haben Gadiyak et al. [28] den Koeffizienten $E_1(\beta_Z)$ durch Bildung des Erwartungswertes der elektrostatischen Elektron-Elektron Wechselwirkung mit vereinfachten Wasserstoffwellenfunktionen im Magnetfeld der Stärke β_Z bestimmt. Für einige Werte von $\beta_Z \leq 0.5$

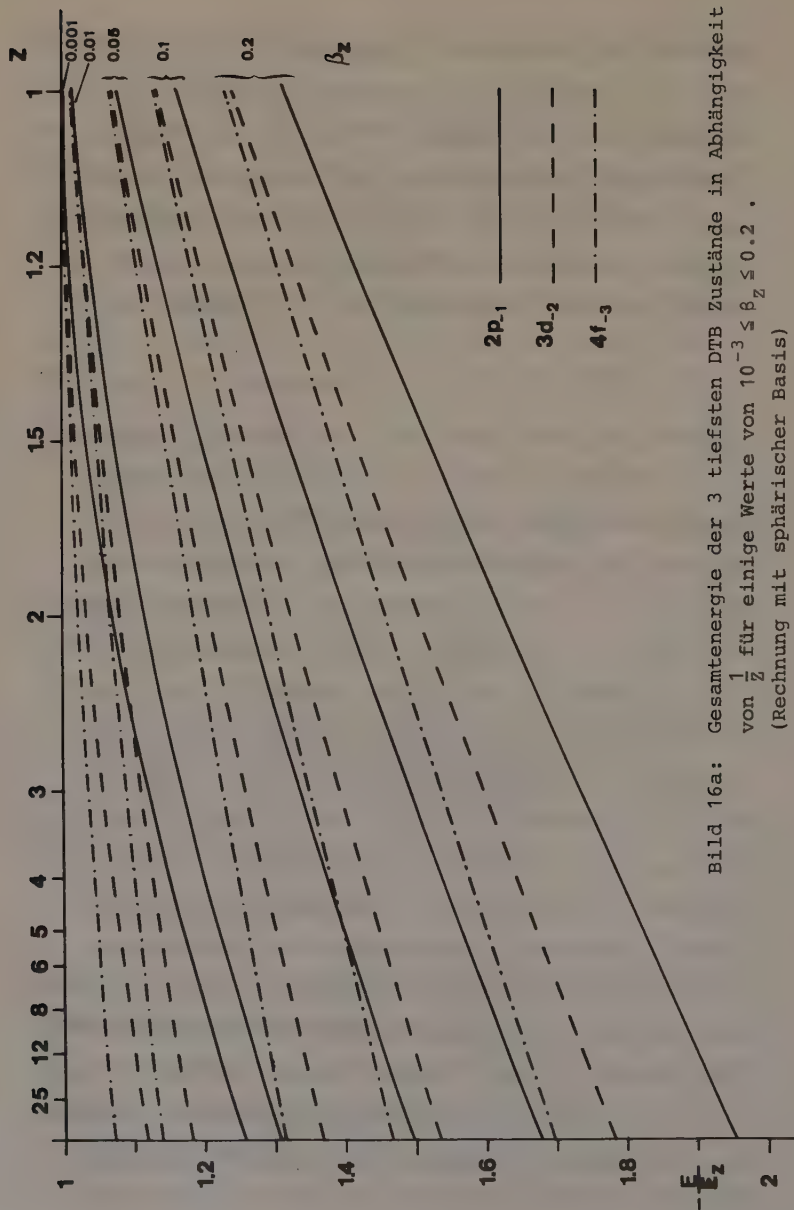


Bild 16a: Gesamtenergie der 3 tiefsten DTB Zustände in Abhängigkeit von $\frac{1}{Z}$ für einige Werte von $10^{-3} \leq \beta_Z \leq 0.2$. (Rechnung mit sphärischer Basis)

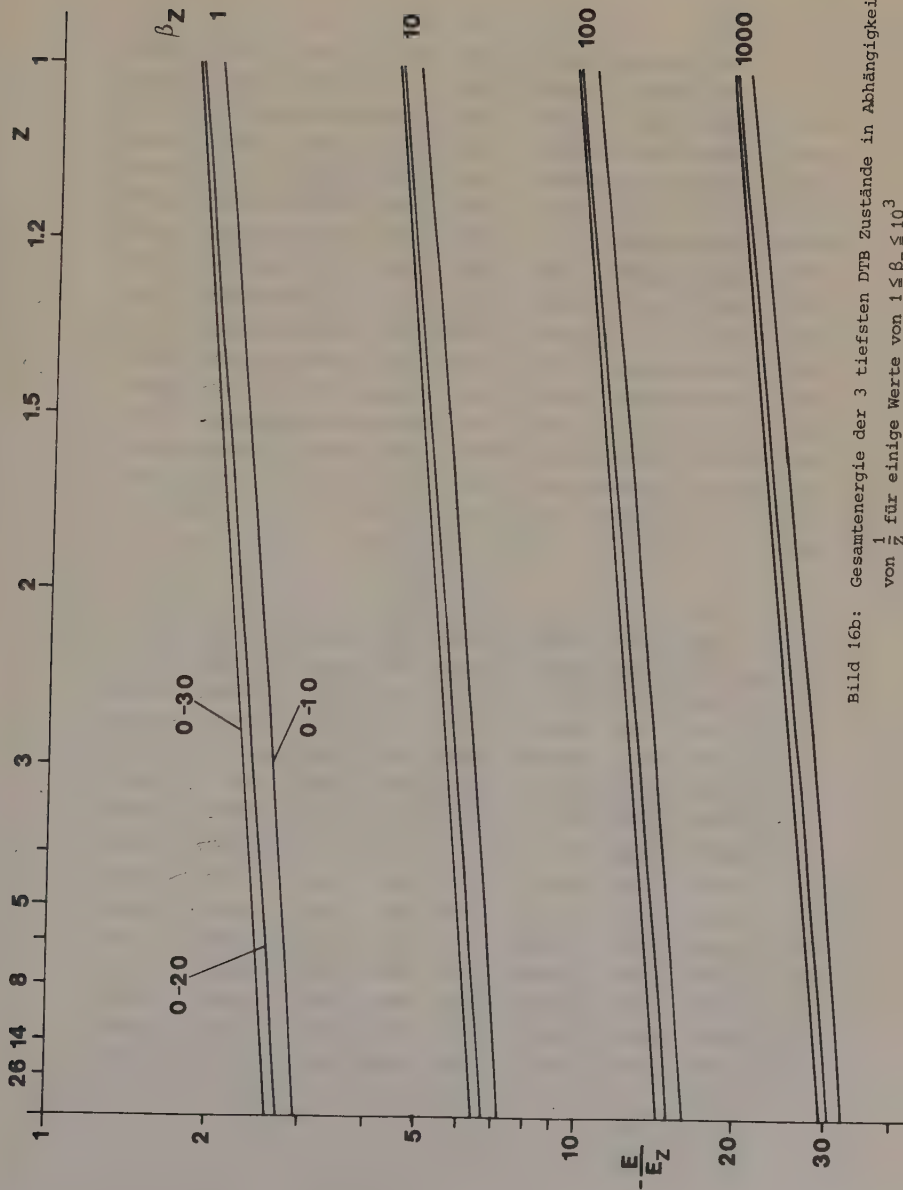


Bild 16b: Gesamtenergie der 3 tiefsten DTB Zustände in Abhängigkeit von $\frac{1}{Z}$ für einige Werte von $1 \leq \beta Z \leq 10^3$
(Rechnung mit unbedingtem Spin)

Tabelle 16a: $2p_{-1}/0-10$

β_z	E_0	E_1	E_2	E_0^{ex}	$\frac{\Delta E_0}{E_0^{ex}} [\%]$	E_1^{ex}	E_2^{ex}	E_3^{ex}
$1 \cdot 10^{-4}$	-1.25332	0.492130	-0.237071	-1.25060	0.22	0.451289	-0.130382	-0.072060
$1 \cdot 10^{-3}$	-1.25834	0.487630	-0.230145	-1.25596	0.19	0.451456	-0.134604	-0.065069
$1 \cdot 10^{-2}$	-1.30794	0.465743	-0.174340	-1.30744	0.038	0.456413	-0.146209	-0.020934
$5 \cdot 10^{-2}$	-1.49604	0.504983	-0.089029	-1.49609	0.0033	0.505568 (0.50332)	-0.090144	+0.000541
$1 \cdot 10^{-1}$	-1.67814	0.571530	-0.058054	-1.67825	0.0066	0.573187 (0.56738)	-0.062307	+0.002834
$2 \cdot 10^{-1}$	-1.95686	0.680060	-0.040783	-1.95697	0.0056	0.681717	-0.045056	+0.002857
$5 \cdot 10^{-1}$	-2.49848	0.911233	-0.031629	-2.49855	0.0028	0.912140 (0.82547)	-0.033974	+0.001572
1	-2.95417	0.987310	-0.028324	-2.95388	0.0098	0.983043	-0.016605	+0.008150
2	-3.89635	1.33677	-0.046244	-3.89587	0.012	1.32968	-0.026840	+0.013464
5	-5.55636	1.97508	-0.085454	-5.55546	0.016	1.96176	-0.049031	+0.025238
$1 \cdot 10^1$	-7.20305	2.63042	-0.132457	-7.20165	0.019	2.60965	-0.075716	+0.039296
$5 \cdot 10^1$	-12.7472	4.94692	-0.335299	-12.7438	0.027	4.89589	-0.196278	+0.096070
$1 \cdot 10^2$	-16.0662	6.38972	-0.481274	-16.0613	0.030	6.31822	-0.286567	+0.134511
$5 \cdot 10^2$	-26.5562	11.1136	-1.02036	-26.5468	0.036	10.9751	-0.643939	+0.259701
$1 \cdot 10^3$	-32.4809	13.8525	-1.36012	-32.4690	0.037	13.6770	-0.883206	+0.328924

Tabelle 16b: $3d_{-2}/0-20$

β_z	E_0	E_1	E_2	E_0^{ex}	$\frac{\Delta E_0}{E_0^{ex}} [\%]$	E_1^{ex}	E_2^{ex}	E_3^{ex}
$1 \cdot 10^{-4}$	-1.11189	0.221484	-0.109844	-1.11191	0.0018	0.221685	-0.110025	-0.000082
$1 \cdot 10^{-3}$	-1.11857	0.216180	-0.099857	-1.11899	0.038	0.222061	-0.113963	+0.008618
$1 \cdot 10^{-2}$	-1.18034	0.226027	-0.061523	-1.18117	0.070	0.235265	-0.084047	+0.013995
$5 \cdot 10^{-2}$	-1.36793	0.336883	-0.1040767	-1.36819	0.019	0.339347	-0.046372	+0.003229
$1 \cdot 10^{-1}$	-1.53436	0.432571	-0.034088	-1.53448	0.0078	0.433297	-0.035296	+0.000395
$2 \cdot 10^{-1}$	-1.78368	0.566619	-0.027640	-1.78374	0.0034	0.566642	-0.027162	-0.000634
$5 \cdot 10^{-1}$	-2.25884	0.826921	-0.021611	-2.25887	0.0013	0.827417	-0.022901	+0.000868
1	-2.72504	0.969344	-0.068577	-2.72376	0.047	0.950798	-0.018877	-0.033900
2	-3.59908	1.31180	-0.102194	-3.59721	0.052	1.28469	-0.029525	-0.049583
5	-5.14305	1.93949	-0.173764	-5.13980	0.063	1.89286	-0.049537	-0.084346
$1 \cdot 10^1$	-6.67850	2.58187	-0.250304	-6.67392	0.068	2.51620	-0.075362	-0.118753
$5 \cdot 10^1$	-11.8710	4.85300	-0.551864	-11.8615	0.080	4.71684	-0.189480	-0.245814
$1 \cdot 10^2$	-14.9927	6.26732	-0.753068	-14.9802	0.084	6.08771	-0.275097	-0.324194
$5 \cdot 10^2$	-24.9077	10.8982	-1.44434	-24.8860	0.087	10.5871	-0.616909	-0.561086
$1 \cdot 10^3$	-30.5336	13.5852	-1.85830	-30.5070	0.087	13.2048	-0.846638	-0.685806

Tabelle 16c: $4f_{-3}/0-30$

β_z	E_0	E_1	E_2	E_0^{ex}	$\frac{\Delta E_0}{E_0^{ex}} [\%]$	E_1^{ex}	E_2^{ex}	E_3^{ex}
$1 \cdot 10^{-4}$	-1.06343	0.124162	-0.061201	-1.06350	0.0063	0.125067	-0.063302	+0.001276
$1 \cdot 10^{-3}$	-1.07174	0.119591	-0.050264	-1.07217	0.040	0.125746	-0.065519	+0.009839
$1 \cdot 10^{-2}$	-1.13835	0.150493	-0.027476	-1.13885	0.044	0.159132	-0.052498	+0.018135
$5 \cdot 10^{-2}$	-1.31410	0.263875	-0.020753	-1.31416	0.0049	0.264690	-0.022450	+0.000917
$1 \cdot 10^{-1}$	-1.46741	0.353653	-0.018972	-1.46744 ^a	0.0021	0.353949	-0.019383	+0.000087
$2 \cdot 10^{-1}$	-1.69686	0.480077	-0.017065	-1.69686 ^a	0.0002	0.480045	-0.016668	-0.000431
$5 \cdot 10^{-1}$	-2.13091	0.726983	-0.014618	-2.13090 ^a	0.0003	0.726769	-0.013793	-0.000694
1	-2.59740	0.881380	-0.072778	-2.59622	0.045	0.863101	-0.020145	-0.039121
2	-3.43203	1.19470	-0.106279	-3.43034	0.049	1.16865	-0.030936	-0.056006
5	-4.90767	1.76853	-0.172635	-4.90501	0.054	1.72738	-0.053639	-0.088443
$1 \cdot 10^1$	-6.37702	2.35961	-0.245983	-6.37331	0.058	2.30227	-0.080127	-0.123295
$5 \cdot 10^1$	-11.3564	4.46267	-0.531898	-11.3489	0.066	4.34633	-0.195197	-0.250384
$1 \cdot 10^2$	-14.3561	5.77520	-0.712195	-14.3467	0.065	5.62900	-0.286882	-0.317630
$5 \cdot 10^2$	-23.9105	10.1193	-1.35539	-23.8946	0.067	9.87078	-0.630478	-0.542580
$1 \cdot 10^3$	-29.3461	12.6569	-1.73989	-29.3269	0.066	12.3561	-0.861096	-0.658560

Tabelle 16: Entwicklungskoeffizienten der Gesamtenergie nach $1/z$ für 3 DTB Zustände im Bereich von $10^{-4} \leq \beta_z \leq 10^3$ bei 1-Konfigurationsrechnung.

Für $\beta_z < 1$ Rechnung mit sphärischer, für $\beta_z \geq 1$ mit zylindrischer Basis.

a) $1s2p_{-1}/000\ 0-10$

b) $1s3d_{-2}/000\ 0-20$

c) $1s4f_{-3}/000\ 0-30$

■ : Energien berechnet durch Extrapolation der Werte bei $z=26$ und 25 nach $1/z=0$.

können die Energien $E_0(\frac{1}{Z} = 0, \beta_Z)$ und die Koeffizienten $E_1(\beta_Z)$ der Entwicklung (V.4) in ihrer Arbeit gefunden werden. In Tabelle 16 sind für $\beta_Z = 0.05, 0.1$ und 0.5 die Koeffizienten in Klammern angegeben.

Ein Vergleich verschiedener Methoden und die Untersuchung ihrer Gültigkeitsbereiche kann am Beispiel des Singulettzustandes $1s^2 \ ^1S$ und des Triplettzustandes $1s2s \ ^3S$ in der Arbeit von Thurner et al. [29] nachgelesen werden.

Ionisierungsenergien

Eine wichtige Größe eines Atoms ist die Energie $E_I^{(A)}$, die notwendig ist, um ein Elektron ins Kontinuum zu heben, d.h. um das Atom, das sich im Zustand A befindet, zu ionisieren (Ionisierungsenergie $E_I^{(A)}$). Im Fall des Zweielektronensystems berechnet sich $E_I^{(A)}$ nach folgender Formel:

$$E_I^{(A)}(\beta_Z, \frac{1}{Z}) = -E^{(A)}(\beta_Z, \frac{1}{Z}) + E_{1s_0/000}(\beta_Z) \quad (V.6)$$

$E_I^{(A)}(\beta_Z, \frac{1}{Z})$ Gesamtenergie des Atoms mit der Kernladungszahl Z im Zustand A

$E_{1s_0/000}(\beta_Z)$ Gesamtenergie des Einelektronensystems.

In Bild 17 sind die Verläufe der Ionisierungsenergie E_I der DTB Zustände mit $m = -1, -2$ und -3 für Fe XXV und He I aufgetragen, wobei für $E_{1s_0/000}(\beta_Z)$ die besten Wasserstoffwerte eingesetzt wurden.

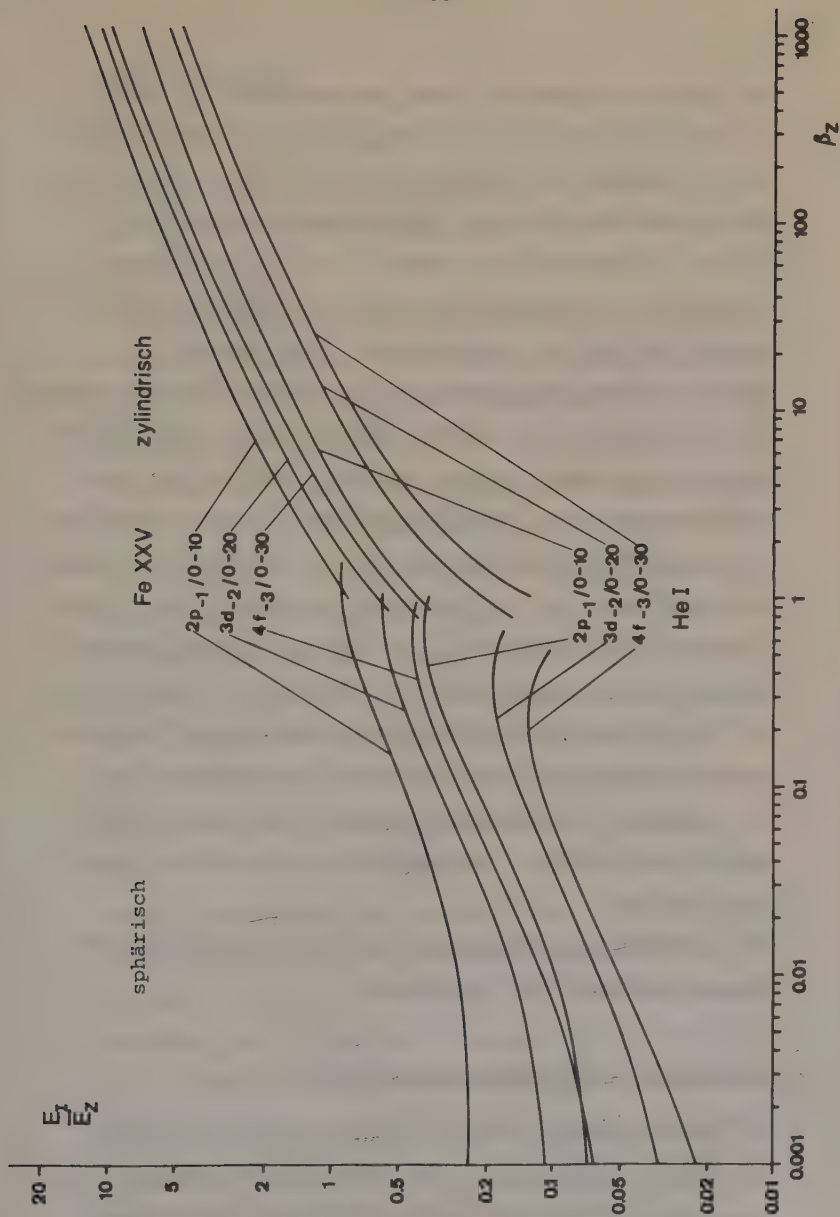


Bild 17: Ionisierungsenergie der 3 tiefsten DTB Zustände für Fe XXV und He I in Abhängigkeit von β_Z (bezogen auf beste Wasserstoffenergien).

Die Ionisierungsenergie nimmt mit wachsendem β_z sowohl auf der sphärischen als auch auf der zylindrischen Seite zu. Im Verlauf ist auch hier deutlich bei $\beta_z \sim 1$ das unterschiedliche Verhalten der Ionisierungsenergien für die beiden Rechenansätze zu erkennen. Auf der sphärischen Seite nimmt mit wachsendem β_z die Güte der Energien ab, während sie auf der zylindrischen Seite zunimmt.

Nun ist es aber nicht konsistent 1-Konfigurationsrechnungen, die hier durchgeführt wurden, auf Multikonfigurationsrechnungen zu beziehen. Deshalb wurden in Bild 18 die Ionisierungsenergien für He I bezogen auf die entsprechenden 1-Konfigurationswasserstoffwerte und die Ionisierungsenergien des Bildes 17 zum Vergleich gestrichelt aufgetragen. Entsprechend bedeutet hier, daß die sphärischen Energien bezogen auf die sphärischen und die zylindrischen bezogen auf die zylindrischen 1-Konfigurationswasserstoffwerte ermittelt wurden. In dieser Abbildung sind außerdem für $\beta_z = 1$ und 0.5 die Werte der zylindrischen Seite bezogen auf die sphärischen 1-Konfigurationswasserstoffwerte gekennzeichnet.

Die Ionisierungsenergien der ETB Zustände werden im folgenden Abschnitt V.2. untersucht.

V.2. Einfluß von Konfigurationsmischungen

Um den Einfluß von Konfigurationsmischungen auf die Energien zu untersuchen, wurden folgende Zustände durch Hinzunahme höherer Drehimpulse bei kugelsymmetrischer

Basis berechnet.

$m = 0$: $1s2p_0$ und $1s2s$

$m = -1$: $1s2p_{-1}$, $1s3d_{-1}$ und $1s3p_{-1}$

$m = -2$: $1s3d_{-2}$, $1s4f_{-2}$ und $1s4d_{-2}$

$m = -3$: $1s4f_{-3}$

Alle Zustände wurden mit einem 2-Konfigurationsansatz, und $1s2p_{-1}$ wurde auch mit einem 3-Konfigurationsansatz behandelt. Die so ermittelten Gesamtenergien sind in den Tabellen 17 (Fe XXV) und 18 (He I) angegeben. (Die Zustände $1s3p_{-1}$ und $1s4d_{-2}$ wurden nicht aufgenommen.) In den Tabellen ist jeweils die Ziffer unterstrichen, bis zu der die 1- und Mehrkonfigurationsergebnisse übereinstimmen. Ist keine Ziffer unterstrichen, so unterscheiden sie sich bereits in der ersten Stelle. In Bild 19 sind die Ionisierungsenergien der tiefsten DTB Zustände mit $m = -1, -2$ und -3 bezogen auf die besten Wasserstoffwerte für He I in Abhängigkeit von β_z für Mehrkonfigurationsrechnungen aufgetragen. Die Anzahl der Konfigurationen ist an den Kurven jeweils explizit angegeben. Zum Vergleich sind auch die Ionisierungsenergien eingetragen - berechnet mit zylindrischer Basis und bezogen auf die besten Wasserstoffenergien dieser drei Zustände. Für die Energie des Zustandes $1s2p_{-1}$ liefert die Beimischung der Konfiguration $1s4f_{-1}$ bei $\beta_z = 1$ und der Kernladungszahl $Z = 2(26)$ eine Absenkung von 6.08 (4.50)%, und die zusätzliche Beimischung der Konfiguration $1s6h_{-1}$

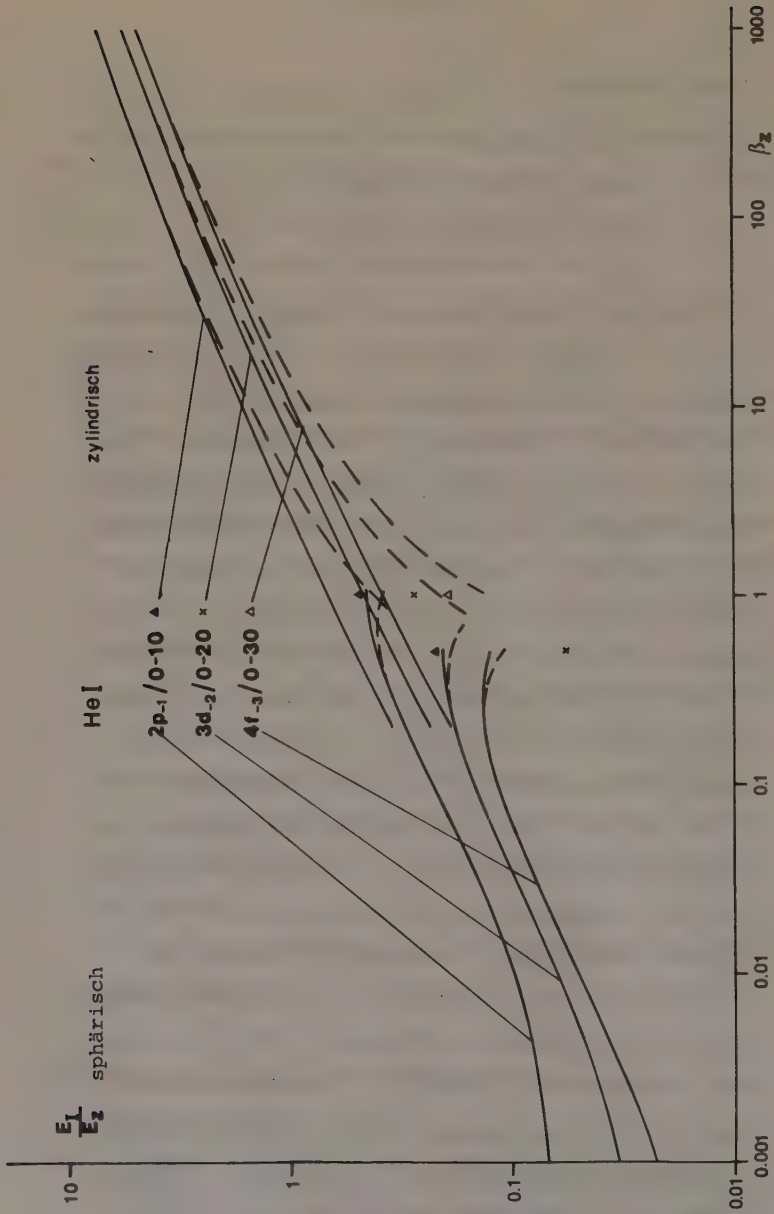


Bild 18: Ionisierungsenergie der Zustände aus Bild 17 für He I in Abhängigkeit von β_Z (bezogen auf 1-Konfigurationswasserstoffenergien).

Zustand							
β_z	$2p_{-1}/0-10$	$3d_{-2}/0-20$	$4f_{-3}/0-30$	$2p_0/001$	$3d_{-1}/0-11$	$4f_{-2}/0-21$	$2s_0/002$
1 10^{-4}	1.23343 <u>9</u>	1.10354 <u>9</u>	1.05878 <u>1</u>	1.23324 <u>0</u>	1.10334 <u>9</u>	1.05858 <u>2</u>	1.23607 <u>8</u>
1.5 10^{-4}	1.23373 <u>9</u>	1.10394 <u>7</u>	1.05927 <u>7</u>	1.23343 <u>9</u>	1.10364 <u>8</u>	1.05897 <u>9</u>	1.23627 <u>8</u>
2 10^{-4}	1.23403 <u>9</u>	1.10434 <u>5</u>	1.05977 <u>1</u>	1.23363 <u>9</u>	1.10394 <u>7</u>	1.05937 <u>5</u>	1.23647 <u>8</u>
3 10^{-4}	1.23463 <u>7</u>	1.10513 <u>9</u>	1.06075 <u>4</u>	1.23403 <u>8</u>	1.10454 <u>3</u>	1.06016 <u>1</u>	1.23687 <u>6</u>
5 10^{-4}	1.23583 <u>3</u>	1.10672 <u>0</u>	1.06269 <u>8</u>	1.23483 <u>6</u>	1.10573 <u>0</u>	1.06172 <u>0</u>	1.23767 <u>1</u>
7 10^{-4}	1.23702 <u>6</u>	1.10829 <u>2</u>	1.06461 <u>5</u>	1.23563 <u>2</u>	1.10691 <u>1</u>	1.06325 <u>7</u>	1.23846 <u>3</u>
1 10^{-3}	1.23881 <u>2</u>	1.11063 <u>1</u>	1.06744 <u>0</u>	1.23682 <u>5</u>	1.10867 <u>0</u>	1.06552 <u>5</u>	1.23964 <u>8</u>
1.5 10^{-3}	1.24177 <u>8</u>	1.11448 <u>4</u>	1.07201 <u>5</u>	1.23880 <u>6</u>	1.11157 <u>1</u>	1.06920 <u>5</u>	1.24160 <u>9</u>
2 10^{-3}	1.24473 <u>0</u>	1.11827 <u>8</u>	1.07643 <u>2</u>	1.24078 <u>1</u>	1.11443 <u>2</u>	1.07276 <u>4</u>	1.24355 <u>4</u>
3 10^{-3}	1.25059 <u>2</u>	1.12569 <u>6</u>	1.08483 <u>3</u>	1.24470 <u>1</u>	1.12003 <u>9</u>	1.07954 <u>8</u>	1.24739 <u>8</u>
5 10^{-3}	1.26215 <u>4</u>	1.13988 <u>5</u>	1.10018 <u>9</u>	1.25247 <u>1</u>	1.13081 <u>1</u>	1.09198 <u>0</u>	1.25490 <u>2</u>
7 10^{-3}	1.27350 <u>1</u>	1.15329 <u>4</u>	1.11407 <u>2</u>	1.26012 <u>0</u>	1.14103 <u>9</u>	1.10323 <u>1</u>	1.26216 <u>3</u>
1 10^{-2}	1.29012 <u>9</u>	1.17216 <u>3</u>	1.13295 <u>0</u>	1.27137 <u>8</u>	1.15549 <u>4</u>	1.11851 <u>5</u>	1.27261 <u>3</u>
1.5 10^{-2}	1.31684 <u>7</u>	1.20099 <u>4</u>	1.16094 <u>5</u>	1.28959 <u>2</u>	1.17767 <u>1</u>	1.14111 <u>3</u>	1.28891 <u>8</u>
2 10^{-2}	1.34241 <u>8</u>	1.22737 <u>4</u>	1.18608 <u>7</u>	1.30715 <u>6</u>	1.19801 <u>1</u>	1.16131 <u>8</u>	1.30396 <u>2</u>
3 10^{-2}	1.39056 <u>8</u>	1.27505 <u>4</u>	1.23101 <u>2</u>	1.34053 <u>1</u>	1.23479 <u>1</u>	1.19718 <u>4</u>	1.33085 <u>3</u>
5 10^{-2}	1.47749 <u>3</u>	1.35773 <u>0</u>	1.30836 <u>1</u>	1.40149 <u>7</u>	1.29834 <u>9</u>	1.25816 <u>7</u>	1.37528 <u>4</u>
7 10^{-2}	1.55529 <u>4</u>	1.43002 <u>8</u>	1.37587 <u>2</u>	1.45648 <u>4</u>	1.35349 <u>1</u>	1.31055 <u>0</u>	1.41165 <u>5</u>
1 10^{-1}	1.65997 <u>6</u>	1.52618 <u>6</u>	1.46567 <u>8</u>	1.53058 <u>2</u>	1.42593 <u>6</u>	1.37891 <u>6</u>	1.45715 <u>7</u>
1.5 10^{-1}	1.81219 <u>1</u>	1.66486 <u>9</u>	1.59526 <u>8</u>	1.63760 <u>0</u>	1.52812 <u>5</u>	1.47465 <u>7</u>	1.51778 <u>0</u>
2 10^{-1}	1.94491 <u>9</u>	1.78508 <u>6</u>	1.70761 <u>7</u>	1.72939 <u>1</u>	1.61404 <u>9</u>	1.55430 <u>3</u>	1.56469 <u>9</u>
3 10^{-1}	2.17100 <u>2</u>	1.98846 <u>8</u>	1.89752 <u>5</u>	1.88068 <u>2</u>	1.75256 <u>9</u>	1.68183 <u>4</u>	1.62797 <u>3</u>
5 10^{-1}	2.52568 <u>2</u>	2.30330 <u>9</u>	2.19050 <u>9</u>	2.10001 <u>0</u>	1.94556 <u>2</u>	1.85461 <u>6</u>	1.67183 <u>7</u>
7 10^{-1}	2.80248 <u>1</u>	2.54434 <u>7</u>	2.41344 <u>2</u>	2.25083 <u>1</u>	2.07030 <u>7</u>	1.96091 <u>1</u>	
1	3.13069 <u>9</u>	2.82307 <u>5</u>	2.66896 <u>9</u>	2.39997 <u>6</u>	2.18029 <u>9</u>	2.04516 <u>6</u>	
1.5	3.53849 <u>7</u>	3.15454 <u>6</u>	2.96788 <u>5</u>	2.51984 <u>8</u>	2.23921 <u>7</u>		
2	3.83988 <u>6</u>	3.38404 <u>1</u>		2.54333 <u>9</u>			
3	4.25469 <u>4</u>	3.66252 <u>5</u>					

Tabelle 17: Gesamtenergien in Einheiten von $-E_z$ einiger Zustände im Bereich von $10^{-4} \leq \beta_z \leq 3$ für Fe XXV bei Multikonfigurationsrechnung ($2p_{-1}/0-10$ wurde mit 3, alle übrigen Zustände wurden mit 2 Konfigurationen berechnet). Es ist immer die Ziffer unterstrichen, bis zu der die 1- und 2(3)-Konfigurationsrechnungen übereinstimmen. Ist keine Ziffer unterstrichen, so unterscheiden sich ihre Ergebnisse bereits in der ersten Stelle.

Zustand							
8_z	$2p_{-1}/0-10$	$3d_{-2}/0-20$	$4f_{-3}/0-30$	$2p_1/001$	$3d_{-1}/0-11$	$4f_{-2}/0-21$	$2s_0/002$
$1 \cdot 10^{-4}$	1.066318	1.028582	1.016612	1.066118	1.028383	1.016415	1.087525
$1.5 \cdot 10^{-4}$	1.066617	1.028976	1.017096	1.066318	1.028680	1.016803	1.087724
$2 \cdot 10^{-4}$	1.066915	1.029369	1.017574	1.066517	1.028975	1.017187	1.087923
$3 \cdot 10^{-4}$	1.067511	1.030147	1.018511	1.066915	1.029560	1.017939	1.088320
$5 \cdot 10^{-4}$	1.068697	1.031678	1.020312	1.067708	1.030714	1.010390	1.089110
$7 \cdot 10^{-4}$	1.069876	1.033176	1.022025	1.068497	1.031845	1.020775	1.089895
$1 \cdot 10^{-3}$	1.071632	1.035361	1.024448	1.069674	1.033501	1.022731	1.091064
$1.5 \cdot 10^{-3}$	1.074525	1.038852	1.028165	1.071619	1.036157	1.025744	1.092987
$2 \cdot 10^{-3}$	1.077376	1.042172	1.031573	1.073543	1.038694	1.028508	1.094880
$3 \cdot 10^{-3}$	1.082955	1.048380	1.037741	1.077326	1.043461	1.033504	1.098576
$5 \cdot 10^{-3}$	1.093657	1.059528	1.048465	1.084650	1.052066	1.042160	1.105621
$7 \cdot 10^{-3}$	1.103820	1.069529	1.057920	1.091679	1.059810	1.049753	1.112238
$1 \cdot 10^{-2}$	1.118231	1.083149	1.070706	1.101748	1.070368	1.059961	1.121452
$1.5 \cdot 10^{-2}$	1.140544	1.103532	1.089783	1.117512	1.086154	1.075067	1.135248
$2 \cdot 10^{-2}$	1.161298	1.122076	1.107135	1.132898	1.100478	1.088687	1.147528
$3 \cdot 10^{-2}$	1.199631	1.155772	1.138698	1.159761	1.126368	1.113190	1.168881
$5 \cdot 10^{-2}$	1.268358	1.215252	1.194498	1.209053	1.171530	1.155172	1.203645
$7 \cdot 10^{-2}$	1.330388	1.268389	1.244372	1.253269	1.211207	1.192886	1.232041
$1 \cdot 10^{-1}$	1.414962	1.340416	1.311923	1.312843	1.263875	1.241964	1.266999
$1.5 \cdot 10^{-1}$	1.539713	1.446269	1.411005	1.398799	1.338694	1.308729	1.310941
$2 \cdot 10^{-1}$	1.649460	1.539208	1.497791	1.472131	1.401551	1.367668	1.341617
$3 \cdot 10^{-1}$	1.836949	1.697479	1.645135	1.591301	1.501482	1.458375	1.374407
$5 \cdot 10^{-1}$	2.129597	1.941704	1.871207	1.757406	1.633451	1.571912	
$7 \cdot 10^{-1}$	2.355134	2.125664	2.040050	1.863526	1.708622	1.630168	
1	2.617895	2.332528	2.227566	1.954228	1.756067	1.653932	
1.5	2.934609	2.565106	2.433057	1.994483			
2	3.158623	2.711170	2.555858				
3	3.442903	2.849574	2.654298				

Tabelle 18: Gesamtenergien einiger Zustände analog Tabelle 17 für He I.

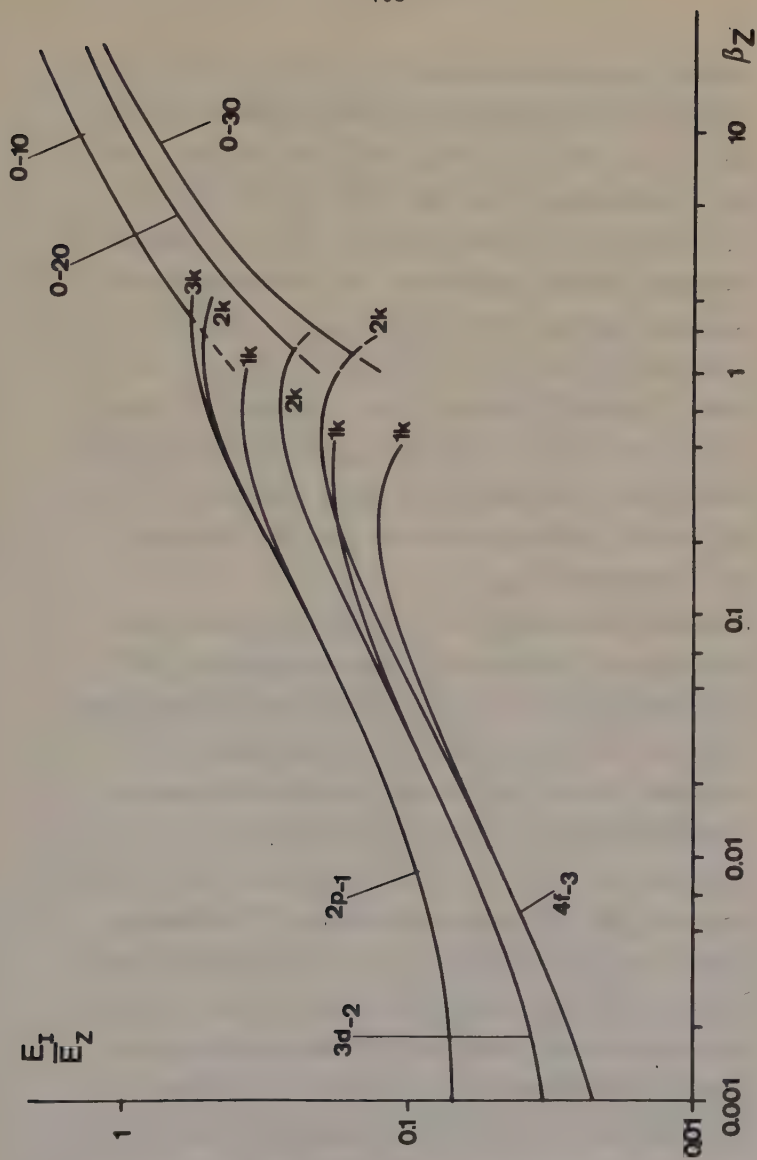


Bild 19: Einfluß von Konfigurationsmischungen auf die Ionisierungsenergie der Zustände aus Bild 17 für He I in Abhängigkeit von β_Z .

liefert eine Absenkung von 1.35 (0.82)%. Bei $\beta_z = 0.5$ bringen die Beimischungen der Konfigurationen $1s4f_{-1}$ zu $1s2p_{-1}$, $1s5g_{-2}$ zu $1s3d_{-2}$ und $1s6h_{-3}$ zu $1s4f_{-3}$ für He I Energieabsenkungen von 3.14%, 4.68% und 5.35%. Der Einfluß der Beimischungen ist also bei höheren Zuständen stärker, während er mit wachsender Kernladungszahl abnimmt. Die Ionisierungsenergien der oben genannten ETB Zustände $1s2p_0$, $1s2s_0$, $1s3d_{-1}$, $1s3p_{-1}$, $1s4f_{-2}$ und $1s4d_{-2}$ von He I sind in Bild 20 in Abhängigkeit von β_z für 1- und Mehrkonfigurationsrechnungen aufgetragen. Außerdem ist in diese Abbildung als Vergleich die Ionisierungsenergie des DTB Zustandes $2p_{-1}/0-10$ eingetragen.

Ionisierungsenergien aus 1-Konfigurationsrechnungen sind auf die 1-Konfigurationswasserstoffwerte und Ionisierungsenergien aus Mehrkonfigurationsrechnungen sind auf die besten Wasserstoffwerte bezogen.

Um einen Eindruck vom Einfluß der Beimischungen zu vermitteln sind in Bild 21 für die jeweils 3 tiefsten Zustände mit $m = -1$ und -2 und den Zustand $1s3s + 1s3d$ mit $m = 0$ die Mischungskoeffizienten c_γ in Abhängigkeit von β_z für He I dargestellt. Die Mischungskoeffizienten sind nur im Intervall $[0.5, 1]$ gezeichnet, da sie bei den hier vorliegenden 2-Konfigurationsrechnungen symmetrisch zur $c_\gamma^2 = 0.5$ -Achse verlaufen.

Bei Zuständen mit kleineren Drehimpulsen bleibt bei zunehmendem Magnetfeld der Einfluß der Beimischungen zunächst geringer als bei Zuständen mit höheren Dreh-

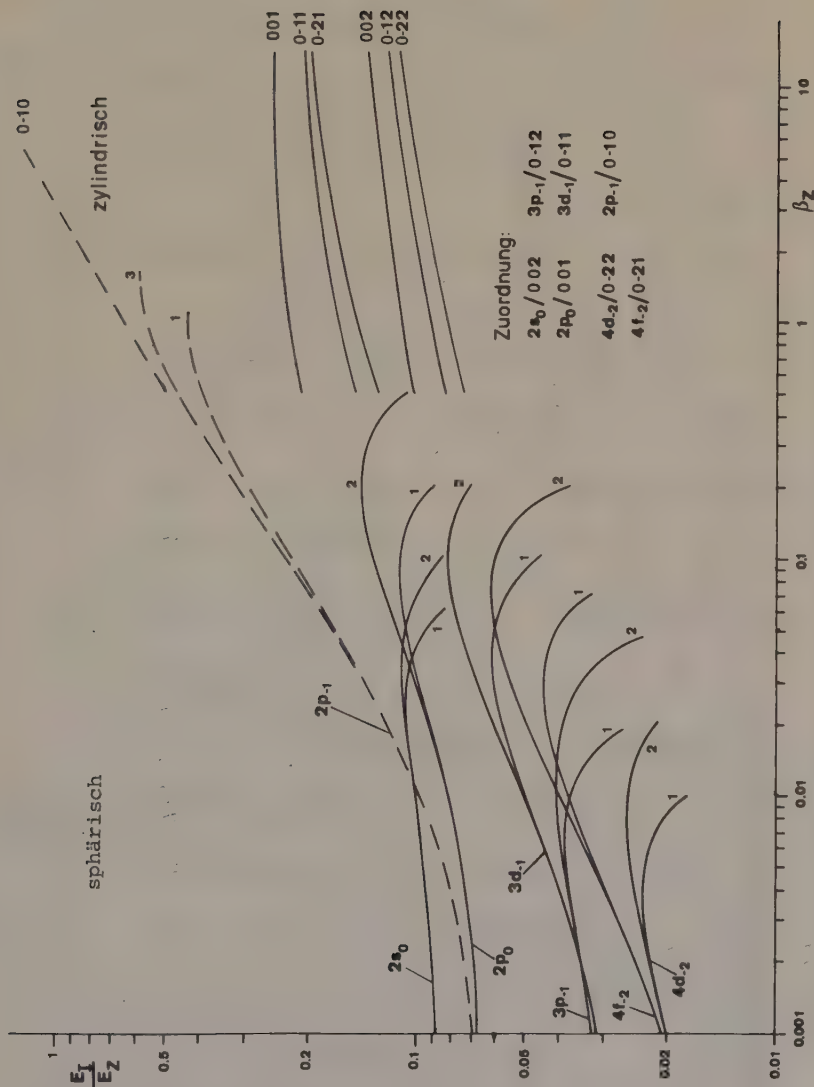
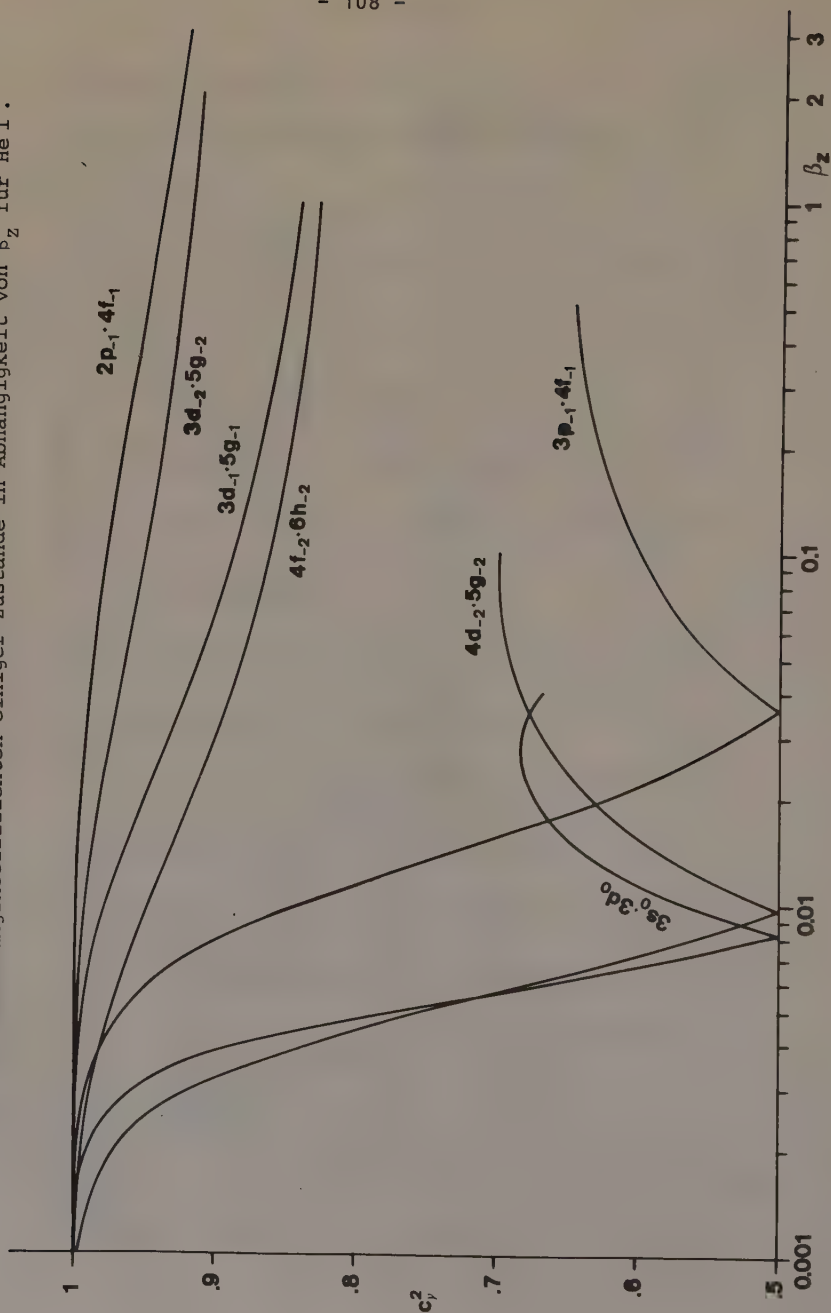


Bild 20: Ionisierungsenergie von ETB Zuständen in Abhängigkeit von β_Z für He I.
Die Ziffern an den Kurven geben die Zahl der Konfigurationen an.

Bild 21: Mischungskoeffizienten einiger Zustände in Abhängigkeit von β_z für He I.



impulsen. Bei weiterer Zunahme der Magnetfeldstärke ordnet sich die Größe des Einflusses nach den Knotenzahlen der Wellenfunktionen. Bei höherer Knotenzahl ist der Einfluß größer; ist die Knotenzahl gleich, so nimmt der Einfluß mit wachsendem $(-m)$ -Wert zu.

V.3. Wellenlängen und Oszillatorstärken

In diesem Abschnitt werden für das Atom He I für einige elektromagnetische Dipol-Übergänge ihre Wellenlängen und Oszillatorstärken in Abhängigkeit von β_z für den Bereich $10^{-5} \leq \beta_z \leq 10^{-2}$ angegeben. Weiterhin wird der Verlauf der Wellenlängen einiger ausgewählter Übergänge im Überlappbereich $10^{-2} \leq \beta_z \leq 10$ untersucht, wobei der Überlapp zwischen den Ergebnissen der Rechnungen mit kugelsymmetrischer und denen mit zylindersymmetrischer Basis diskutiert wird.

In den Tabellen 19 bis 24 sind zunächst für $5 \cdot 10^{-5} \leq \beta_z \leq 10^{-2}$ die Wellenlängen und Oszillatorstärken der Übergänge von $3d_m, 4d_m, 5d_m, 3s_m, 4s_m, 5s_m$, zum Zustand $2p_m$ mit $m', m \leq 0$ aufgeführt.

Die ohne experimentellen Aufhänger berechneten Wellenlängen λ sind um etwa 3% höher als die von S.B. Kemic [22] und R.H. Garstang et al. [21] angegebenen Werte. Am Beispiel des Übergangs $3d_m \rightarrow 2p_m$ will ich den Grund für diese Unterschiede erläutern.

Im feldfreien Fall liegen die exakten Gesamtenergien der Zustände 2^3P und 3^3D bei -2.133164 a.u. und

Tabellen 19 - 24: Wellenlängen λ und Oszillatorstärken f einiger Übergänge $n'l'm' \rightarrow nlm$ im Bereich von $5 \cdot 10^{-5} \leq \beta_Z \leq 10^{-2}$ für He I mit $m', m \leq 0$. Zu jeder m', m Kombination sind in der ersten Zeile die Wellenlängen λ und in der zweiten Zeile die Oszillatorstärken f nach Gl. (III.5) angegeben. Die in Tabelle 19 in Klammern stehenden Wellenlängen wurden durch Anpassen an das Experiment bestimmt.

Tabelle 19 $1s3d_{m'} \longrightarrow 1s2p_m$

		β_z						
m'	m	$5 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-2}$
0	0	6005.8	6005.6	6003.1	5998.1	5975.2	5435.5	4568.5
		0.74813	0.74821	0.74906	0.75075	0.75841	0.90459	1.0742
		(5877.3)	(5877.1)	(5874.7)	(5870.0)	(5848.0)	(5330.1)	(4493.8)
-1	-1	6005.8	6005.5	6003.0	5997.9	5974.4	5452.0	4666.2
		0.56109	0.56115	0.56171	0.56282	0.56780	0.64177	0.68943
		(5877.3)	(5877.1)	(5874.6)	(5869.7)	(5847.3)	(5346.0)	(4588.3)
-1	0	6021.6	6037.3	6098.8	6158.3	6297.8	6951.3	7057.5
		0.55962	0.55822	0.55311	0.54878	0.54101	0.54149	0.53410
		(5892.5)	(5904.5)	(5966.3)	(6023.3)	(6156.7)	(6779.8)	(6880.8)
0	-1	5990.0	5974.1	5910.2	5845.8	5683.3	4473.6	3430.5
		0.18752	0.18803	0.19013	0.19236	0.19847	0.22194	0.30295
		(5862.2)	(5847.0)	(5785.8)	(5724.0)	(5568.1)	(4402.0)	(3388.2)
-2	-1	6021.6	6037.1	6097.3	6154.1	6280.9	6660.7	6435.0
		1.1193	1.1165	1.1068	1.0992	1.0880	1.1067	1.0646
		(5892.5)	(5907.4)	(5965.0)	(6019.3)	(6140.6)	(6503.1)	(6287.7)

Tabelle 20 $1s4d_{m'} \longrightarrow 1s2p_m$

		β_z						
m'	m	$5 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-2}$
0	0	4548.1	4547.4	4540.8	4527.9	4470.9	3580.1	2668.0
		0.14782	0.14792	0.14898	0.15098	0.15884	0.19309	0.15513
-1	-1	4548.0	4547.3	4539.6	4524.6	4459.5	3516.7	2617.5
		0.11087	0.11096	0.11193	0.11374	0.12068	0.15417	0.14485
-1	0	4557.1	4565.5	4594.2	4615.3	4637.3	4085.0	3231.8
		0.11065	0.11052	0.11057	0.11142	0.11569	0.11880	0.07711
0	-1	4539.0	4529.4	4487.5	4440.5	4305.5	3135.9	2235.0
		0.03703	0.03713	0.03770	0.03852	0.04137	0.06080	0.06561
-2	-1	4557.0	4565.0	4589.9	4603.5	4594.5	3762.8	2826.9
		0.22133	0.22116	0.22217	0.22543	0.23841	0.24138	0.16689

Tabelle 21 $1s5d_m \longrightarrow 1s2p_m$

		β_z						
m'	m	$5 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-2}$
0	0	4088.5	4087.1	4072.6	4045.3	3936.6	2796.1	1937.8
		0.05627	0.05645	0.05824	0.06133	0.07087	0.08347	0.05679
-1	-1	4088.4	4086.7	4069.7	4037.8	3913.6	2712.4	1868.2
		0.04221	0.04237	0.04397	0.04667	0.05462	0.06552	0.04951
-1	0	4059.7	4101.4	4113.5	4109.9	4049.8	3038.5	2161.4
		0.04213	0.04222	0.04349	0.04580	0.05257	0.05246	0.03152
0	-1	4081.1	4072.5	4029.7	3975.5	3807.7	2517.6	1698.8
		0.01409	0.01416	0.01472	0.01562	0.01839	0.02581	0.02224
-2	-1	4095.4	4100.3	4104.0	4085.8	3976.7	2735.4	1959.2
		0.08432	0.08465	0.08860	0.09506	0.11142	0.10074	0.05995

Tabelle 22 $1s3s_m \longrightarrow 1s2p_m$

		β_z						
m'	m	$5 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-2}$
0	0	7237.6	7237.0	7231.1	7219.2	7164.7	5949.0	4302.3
		0.21667	0.21602	0.21628	0.21681	0.21920	0.26925	0.33643
0	-1	7214.7	7191.5	7096.8	6999.8	6749.2	4815.7	3278.2
		0.21667	0.21737	0.22019	0.22308	0.23055	0.27974	0.28433

Tabelle 23 $1s4s_m \longrightarrow 1s2p_m$

		β_z						
m'	m	$5 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-2}$
0	0	4795.8	4794.9	4785.0	4765.6	4680.7	3424.0	2306.2
		0.03224	0.03226	0.3247	0.03287	0.03440	0.03728	0.02350
0	-1	4785.7	4774.8	4725.8	4669.0	4499.6	3015.6	1975.4
		0.03231	0.03240	0.03289	0.03359	0.03594	0.04872	0.04641

Tabelle 24 $1s5s_m \longrightarrow 1s2p_m$

		β_z						
m'	m	$5 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-2}$
0	0	4185.1	4183.2	4163.7	4127.0	3981.7	2566.7	1640.5
		0.01147	0.01151	0.01189	0.01254	0.01450	0.01637	0.01105
0	-1	4177.4	4167.9	4118.8	4054.3	3849.9	2330.1	1465.8
		0.01149	0.01155	0.01203	0.01278	0.01507	0.02015	0.01620

-2.055641 a.u. [17,30]. Die berechneten Werte liegen bei -2.131437 a.u. und -2.055572 a.u., so daß sich bei $\beta_Z = 0$ eine Energiedifferenz des Niveauabstandes von 0.001658 a.u. ergibt, um die die berechneten Werte korrigiert werden müssen. Berechnet man nun die Wellenlängen mit diesen an das Experiment angepaßten Niveauabständen, so erhält man die in Tabelle 19 in Klammern gesetzten Wellenlängen, die mit den von S.B. Kemic bestimmten auf 4 Stellen übereinstimmen. Das Spektrum von He I ist für die in den Tabellen angegebenen Übergänge in Abhängigkeit von β_Z für $10^{-5} \leq \beta_Z \leq 10^{-2}$ in Bild 22 graphisch dargestellt, wobei die Kurve $4d_{-1} \rightarrow 2p_{-1}$ nicht eingezeichnet ist, da sie weitgehend mit $4d_0 \rightarrow 2p_0$ zusammenfällt. Im Intervall von $10^{-5} \leq \beta_Z \leq 10^{-3}$ kann man noch eine definierte Zuordnung der Wellenlängen zu den Übergängen treffen. Für $\beta_Z \geq 10^{-3}$ wird diese Zuordnung immer schwieriger. Die auf einer sphärisch-symmetrischen Basis beruhende Näherung bricht letztlich vollständig zusammen. Die Übergänge können nicht mehr in der angegebenen Weise charakterisiert werden.

Für die Übergänge $3d_m \rightarrow 2p_m$ sind in Bild 23 die Oszillatorstärken $f_{\tau, \tau}$ in Abhängigkeit von β_Z aufgetragen. Man erkennt, daß die berechneten f-Werte im Vergleich zu den von S.B. Kemic [22] angegebenen f-Werten - in Bild 23 durch Kreuze gekennzeichnet - um durchschnittlich 2,5 bis 3 % höher liegen.

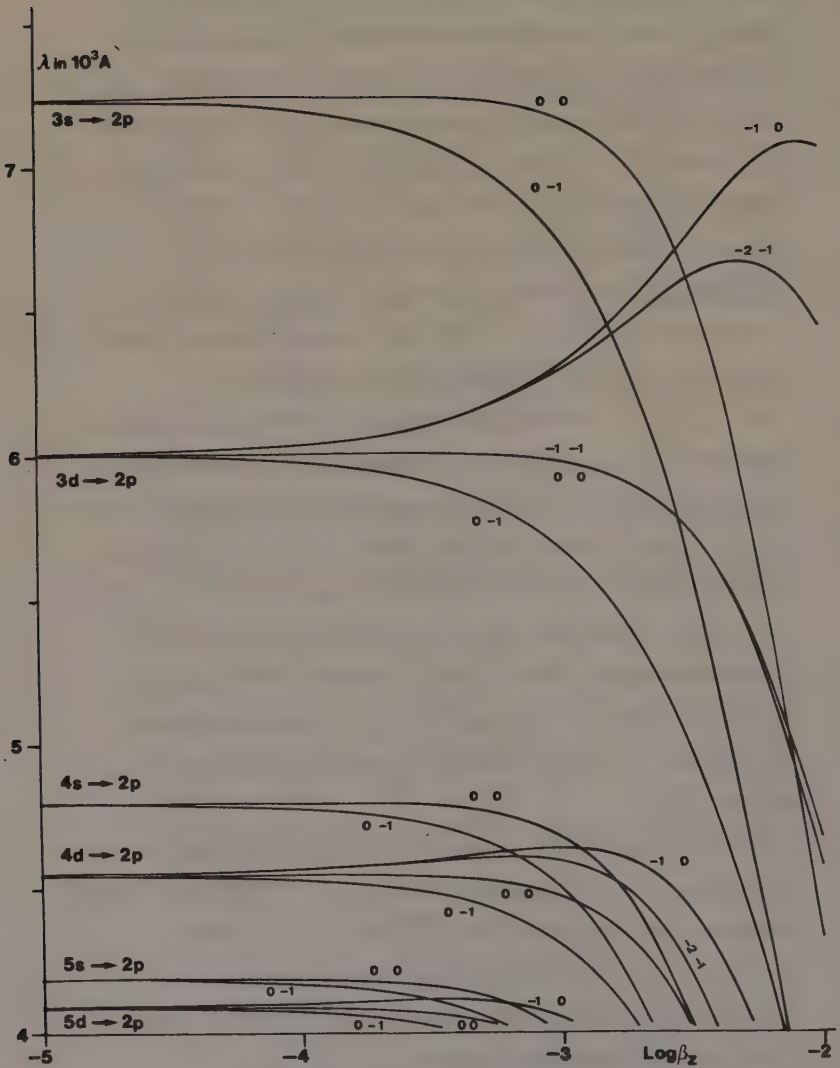


Bild 22: Spektrum einiger Übergänge $\tau' \rightarrow \tau$ in Abhängigkeit von β_Z für He I.
Die Ziffern an den Kurven geben die Kombinationen (m', m) an.

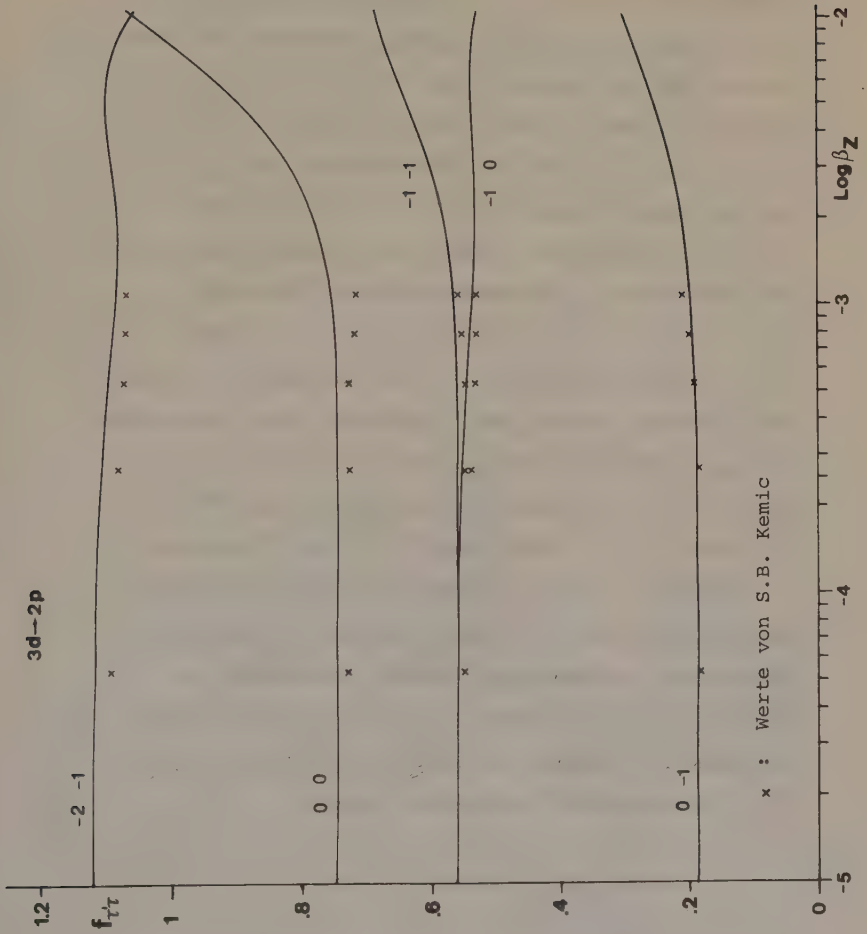


Bild 23: Oszillatorstärken des Überganges $3d_m + 2p_m$ in Abhängigkeit von β_Z für He I. Die Ziffern an den Kurven geben die Kombinationen (m', m) an.

Abschließend möchte ich an Hand des Bildes 24 die Wellenlängen λ einiger Übergänge, berechnet mit sphärischer und mit zylindrischer Basis, vergleichen. Es werden die zwei Übergänge von $2s_m \rightarrow 2p_m$ mit $(m',m) = (0,-1)$ und $(0,0)$ und die vier Übergänge von $3d_m \rightarrow 2p_m$ mit den Kombinationen $(m',m) = (-1,0), (-2,-1), (-1,-1)$ und $(0,-1)$ betrachtet. Gemäß den Zuordnungsvorschriften des Abschnitts I entsprechen sie der Reihe nach $02 \rightarrow -10$, $02 \rightarrow 01$, $-11 \rightarrow 01$, $-20 \rightarrow -10$, $-11 \rightarrow -10$ und $04 \rightarrow -10$. Qualitativ läßt sich die angegebene Zuordnung verifizieren. Die mit der sphärischen Basis berechneten Wellenlängen sind außer bei dem Übergang $3d_{-2} \rightarrow 2p_{-1}$ bzw. $-20 \rightarrow -10$ (Anfangs- und Endzustand sind DTB) bereits bei $\beta_z = 0.1$ immer tiefer als die zylindrischen Ergebnisse, da die 1-Konfigurationsrechnung mit der sphärischen Basis für höhere Zustände bei einem β_z -Wert dieser Größenordnung bereits zusammenbricht, während die entsprechende zylindrische Rechnung für Zustände mit größerer Knotenzahl bis zu Werten von $\beta_z < 1$ ausreichende Ergebnisse liefert.

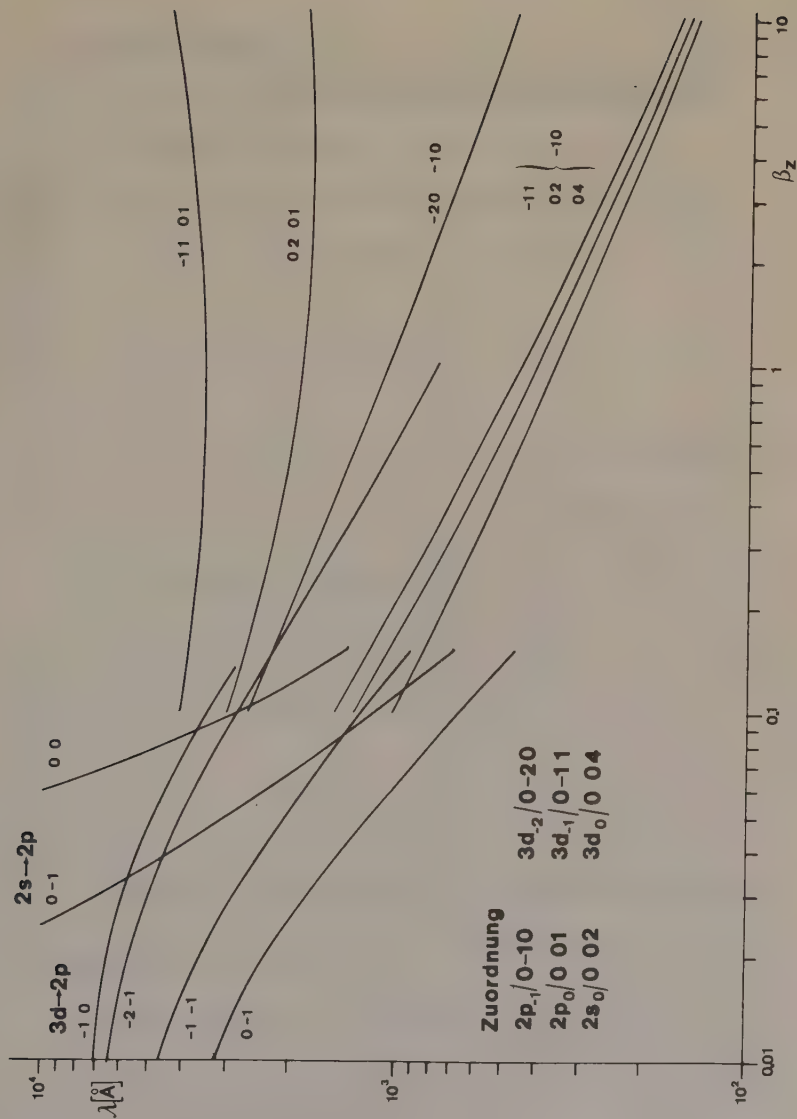


Bild 24: Vergleich der Wellenlängen einiger Übergänge berechnet mit sphärischer und mit zylindrischer Basis für He I.

VI. Anhang

VI.1. Koeffizienten c^2 zur Berechnung der Matrixelemente des diamagnetischen Terms in Gl. (II.12).

l	l'	m	c^2		l	l'	m	c^2
0	2	0	$\sqrt{\frac{1}{5}}$		4	6	0	$\sqrt{\frac{225}{1573}}$
1	1	0	$\frac{2}{5}$				± 1	$\sqrt{\frac{210}{1573}}$
		± 1	$-\frac{1}{5}$				± 2	$2\sqrt{\frac{42}{1573}}$
1	3	0	$\frac{3}{5}\sqrt{\frac{3}{7}}$				± 3	$6\sqrt{\frac{3}{1573}}$
		± 1	$\frac{3}{5}\sqrt{\frac{2}{7}}$				± 4	$3\sqrt{\frac{5}{1573}}$
2	2	0	$\frac{2}{7}$		5	5	0	$\frac{10}{39}$
		± 1	$\frac{1}{7}$				± 1	$\frac{3}{13}$
		± 2	$-\frac{2}{7}$				± 2	$\frac{2}{13}$
2	4	0	$\frac{6}{7}\sqrt{\frac{1}{5}}$				± 3	$\frac{1}{39}$
		± 1	$\frac{1}{7}\sqrt{6}$				± 4	$-\frac{2}{13}$
		± 2	$\frac{1}{7}\sqrt{3}$				± 5	$-\frac{5}{13}$
3	3	0	$\frac{4}{15}$		6	6	0	$\frac{14}{55}$
		± 1	$\frac{1}{5}$				± 1	$\frac{13}{55}$
		± 2	0				± 2	$\frac{2}{11}$
		± 3	$-\frac{1}{3}$				± 3	$\frac{1}{11}$
3	5	0	$\frac{10}{3\sqrt{77}}$				± 4	$-\frac{2}{55}$
		± 1	$\sqrt{\frac{10}{77}}$				± 5	$-\frac{1}{5}$
		± 2	$\sqrt{\frac{1}{11}}$				± 6	$-\frac{2}{5}$
		± 3	$\frac{2}{3}\sqrt{\frac{1}{11}}$					
4	4	0	$\frac{20}{77}$					
		± 1	$\frac{17}{77}$					
		± 2	$\frac{8}{77}$					
		± 3	$-\frac{1}{11}$					
		± 4	$-\frac{4}{11}$					

VI.2. Berechnung der Koeffizienten $c_{S,\alpha}^{M_S}$ mit Hilfe der Projektionsmethode.

Eine Wellenfunktion wird als Linearkombination von Slaterdeterminanten $\Phi_{\alpha M_L M_S}$ dargestellt.

$$\Psi_{S M_L M_S} = \sum_{\alpha=1}^{N_{\alpha}} c_{S,\alpha}^{M_S} \Phi_{\alpha M_L M_S} \quad (VI.1)$$

Zur Berechnung der Koeffizienten seien nun die Konfiguration und die Quantenzahl M_S fest vorgegeben, und N_{α} sei die Zahl der linear unabhängigen Slaterdeterminanten der vorgegebenen Konfiguration und der Quantenzahl M_S . Da die N -Teilchen-Wellenfunktion mit Hilfe von reellen Clebsch-Gordan Koeffizienten aus Einteilchenfunktionen konstruiert wurde, muß man fordern, daß die $c_{S,\alpha}^{M_S}$ reell sind.

Sei nun der Operator P_{S_i} gegeben mit

$$P_{S_i} = S^2 - S_i(S_i + 1).$$

Wird dieser Operator auf (VI.1) angewendet, projiziert er aus der Summe (VI.1) alle Zustände $\Psi_{S M_L M_S}$ mit $S = S_i$ heraus.

Betrachte man nun den Operator P_{S_0} mit

$$P_{S_0} = \prod_{\substack{S_i \\ S_i \neq S_0}} [S^2 - S_i(S_i + 1)]$$

Wird nun dieser Operator auf $\phi_{\alpha M_L M_S}$ angewendet, so erzeugt er ausgehend von $\phi_{\alpha M_L M_S}$ eine Wellenfunktion mit der Quantenzahl S_0 .

Bei der Anwendung des Projektionsoperators ist die Kenntnis der Wirkung von S^2 auf die Slaterdeterminante $\phi_{\alpha M_L M_S}$ nötig.

Hierzu gehen wir von folgender Beziehung aus:

$$S^2 = S_+ S_- + S_z^2 - S_z$$

$$\text{mit } S_{\pm} = \sum_{i=1}^N s_{\pm i} \quad s_{\pm} = s_x \pm i s_y$$

$$S_z = \sum_{i=1}^N s_{z i}$$

Für die Einteilchenoperatoren $s_{\pm i}$ und $s_{z i}$ gilt nun:

$$s_{\pm i} \left| \frac{1}{2} m_{s i} \right\rangle = \sqrt{\left(\frac{1}{2} \mp m_{s i} \right) \left(\frac{3}{2} \pm m_{s i} \right)} \left| \frac{1}{2} m_{s i} \pm 1 \right\rangle$$

$$s_{z i} \left| \frac{1}{2} m_{s i} \right\rangle = m_{s i} \left| \frac{1}{2} m_{s i} \right\rangle$$

Beispiel: Zweielektronensystem mit $M_S = 0$ $S = 0, 1$

$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} u_1 & \frac{1}{2} \\ u_2 & -\frac{1}{2} \end{vmatrix} \quad \phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} u_1 & -\frac{1}{2} \\ u_2 & \frac{1}{2} \end{vmatrix}$$

$$S^2 \left| \phi_1 \right\rangle = \phi_1 + \phi_2$$

Herausprojizieren von $S = 0$ aus ϕ_1 :

$$(S^2 - 2) |\phi_1\rangle = -\phi_1 + \phi_2$$

Durch Normierung erhält man für $\psi_{SM_L M_S}$ mit $M_S = S = 0$

$$\psi_{SM_L M_S} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1 - \phi_2)$$

Herausprojizieren von $S = 1$ aus

$$(S^2 - 0) |\phi_1\rangle = \phi_1 + \phi_2$$

Durch Normierung erhält man für $\psi_{SM_L M_S}$ mit $M = 0, S = 1$

$$\psi_{SM_L M_S} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1 + \phi_2)$$

VI.3. Liste der Bilder

- Bild 1: Gesamtenergie des Triplettzustandes mit $m = -1$ in Abhängigkeit von β_Z und $\frac{1}{Z}$.
- Bild 2: Spektrum des H-Atoms im feldfreien Fall.
- Bild 3: Spektrum des H-Atoms im Magnetfeld.
- Bild 4: Gesamtenergien einiger Zustände des Zweielektronensystems in Abhängigkeit von β_Z für $\frac{1}{Z} = 0$.
- Bild 5: $E = E(\beta_Z, \frac{1}{Z})$ einiger Zustände des Zweielektronensystems.
- Bild 6: $E = E(\beta_Z, \frac{1}{Z} = 0)$ der 3 tiefsten Singulettzustände des Zweielektronensystems.
- Bild 7: $E = E(\beta_Z, Z = 2)$ der 3 tiefsten Singulettzustände des Zweielektronensystems.
- Bild 8: Zuordnung der Zustände für $m = 0$.
- Bild 9: $E = E(\beta_Z, \frac{1}{Z})$ der Zustände $1s3s$ und $1s3d$ für $\frac{1}{Z} = 0$ und $\frac{1}{2}$.
- Bild 10: Zuordnung der Zustände für $m = -1$.
- Bild 11: Zuordnung der Zustände für $m = -2$.
- Bild 12: Zuordnung der Zustände für $m = -3$.
- Bild 13: Gesamtenergie der 3 tiefsten Zustände in Abhängigkeit von β_Z für $Z = 26,2$ und 1 .
- Bild 14: Gesamtenergie der Zustände aus Bild 13 im Bereich von $10^{-3} \leq \beta_Z \leq 10^{-1}$.
- Bild 15: Gesamtenergie der Zustände aus Bild 13 im Bereich von $10^{-1} \leq \beta_Z \leq 2$. (Der $m = -3$ Zustand für $Z = 1$ wurde hier weggelassen.)

- Bild 16a: Gesamtenergie der 3 tiefsten DTB Zustände in Abhängigkeit von $\frac{1}{Z}$ für einige Werte von $10^{-3} \leq \beta_Z \leq 0.2$ (Rechnung mit sphärischer Basis)
- Bild 16b: Gesamtenergie der 3 tiefsten DTB Zustände in Abhängigkeit von $\frac{1}{Z}$ für einige Werte von $1 \leq \beta_Z \leq 10^3$ (Rechnung mit zylindrischer Basis).
- Bild 17: Ionisierungsenergie der 3 tiefsten DTB Zustände für Fe XXV und He I in Abhängigkeit von β_Z (bezogen auf beste Wasserstoffenergien).
- Bild 18: Ionisierungsenergie der Zustände aus Bild 17 für He I in Abhängigkeit von β_Z (bezogen auf 1-Konfigurationswasserstoffenergien).
- Bild 19: Einfluß von Konfigurationsmischungen auf die Ionisierungsenergie der Zustände aus Bild 17 für He I in Abhängigkeit von β_Z .
- Bild 20: Ionisierungsenergie von ETB Zuständen in Abhängigkeit von β_Z für He I. Die Ziffern an den Kurven geben die Zahl der berücksichtigten Konfigurationen an.
- Bild 21: Mischungskoeffizienten einiger Zustände in Abhängigkeit von β_Z für He I.
- Bild 22: Spektrum einiger Übergänge $\tau' \rightarrow \tau$ in Abhängigkeit von β_Z für He I. Die Ziffern an den Kurven geben die Kombinationen (m', m) an.
- Bild 23: Oszillatorstärken des Übergangs $3d_m \rightarrow 2p_m$ in Abhängigkeit von β_Z für He I. Die Ziffern an den Kurven geben die Kombinationen (m', m) an.

Bild 24: Vergleich der Wellenlängen einiger Übergänge
berechnet mit sphärischer und mit zylindri-
scher Basis für He I in Abhängigkeit von β_z .

Literatur

- 1 Garstang R.H., High Magnetic Field Spectroscopy in Astrophysics, J. de Physique, Coll. C2 page 19 (1982)
- 2 Angel J.R.P., Borra E.F. and Landstreet J.D., Astrophys. J. Suppl. 45, 457 (1981)
- 3 Manchester R.N., in "Pulsars", IAU, Coll. No. 95, ed. Siber W. and Willebinski R., Reidel, Dordrecht, Holland 1981
- 4 Trümper J., Pietsch W., Reppin C., Sacco B., Kendziorra E., Staubert R., Ann. New York Acad. Sci. 302, 538 (1977)
- 5 Wunner G., Ruder H., Electromagnetic Transitions for the Hydrogen Atom in Strong Magnetic Fields, The Astrophysical Journal 242, 828 (1980)
- 6 Wunner G., Ruder H. and Herold H., Energy Levels and Oscillator Strengths for the Two-Body Problem in Magnetic Fields, The Astrophysical Journal 247, 347 (1981)
- 7 Wunner G., Ruder H. and Herold H., Quality of One-Configuration HF-Type Calculations for the H-Atom in Arbitrary Magnetic Fields, Physics Letters A 85A, 430 (1981)
- 8 Wunner G. and Ruder H., Energy Levels and Electromagnetic Transitions of Atoms in Superstrong Magnetic Fields, J. de Physique, Coll. C2 page 137 (1982)
- 9 Kara S.M., McDowell M.R.C., J. Phys. B 13, 1337 (1980)

- 10 Rösner W., Das H-Atom in Magnetfeldern zwischen 50T und 5 10 T, Doktorarbeit Erlangen 1982
- 11 Rösner W., Herold H., Ruder H. and Wunner G., Approximate Solution of the Strongly Magnetized Hydrogen Problem Using an Asymptotic Property, Phys. Rev. A in press (1983)
- 12 Simola J. and Virtamo J., Energy Levels of Hydrogen Atoms in a Strong Magnetic Field, J. Phys. B 11, 3309 (1978)
- 13 Heitler W., "The Quantum Theory of Radiation", Oxford 1960
- 14 Froese Fischer C., A General Multi-Configuration Hartree-Fock Program, CPC 14, 145 (1978)
- 15 Froese Fischer C., A Multi-Configuration Hartree-Fock Program, CPC 1, 151 (1969)
- 16 Froese C., Numerical Solution of the Hartree-Fock Equations, Canadian J. of Phys. 41, 1895 (1963)
- 17 Froese Fischer C., The Hartree-Fock Method for Atoms, A Numerical Approach; Wiley-Interscience Publication John Wiley & Sons, New York 1977
- 18 Dittrich W., Multikonfigurationsrechnungen mit dem Hartree-Fock Verfahren bei hochionisierten Atomen, Diplomarbeit Erlangen 1975
- 19 Hofmann H., Berechnung von Oszillatorstärken mit Hartree-Fock Wellenfunktionen mit der Anwendung auf hochionisierte Atome, Diplomarbeit Erlangen 1977

- 20 Slater J.C., Quantum Theory of Atomic Structures,
Vol. I+II, New York 1960
- 21 Garstang R.H. and Kemic S.B., Hydrogen and Helium
Spectra in Large Magnetic Fields,
Astrophys. and Space Science 31, 103 (1974)
- 22 Kemic S.B., Wavelengths and Strengths of Hydrogen and
Helium Transitions in Large Magnetic Fields,
Jila Report, Univ. of Colorado 1974
- 23 Körbel H., Doktorarbeit Erlangen 1983
- 24 Pröschel P., Hartree-Fock Rechnungen an Atomen in
extrem starken magnetischen Feldern,
Doktorarbeit Erlangen 1982
- 25 Avron J.E., Herbst I.B. and Simon B.,
Phys. Rev. Lett. 39, 1068 (1977)
- 26 Larsen D.M., Variational Studies of Bound States of
the H^- -Ion in a Magnetic Field,
Phys. Rev. B, 20, 5217 (1979)
- 27 Hylleraas E.A., Über den Grundterm der Zweielektronen-
probleme von H^- , He, Li^+ , Be^{++} usw.
Zs. f. Phys. 65, 209 (1930)
- 28 Gadiyak G.V., Lozovik Y u. E., Mashchenko A.I. and
Obrecht M.S., The Spectrum and Dipole and Quadrupole
Moments of Hydrogen-Like and Helium-Like Ions in
Superstrong Fields,
J. Phys. B: At. Mol. Phys. 15, 2615 (1982)

- 29 Thurner G., Herold H., Ruder H., Schlicht G. and
Wunner G., Note on Binding Energies of Helium-Like
Systems in Magnetic Fields
Phys. Lett. A 89A, 133 (1982)
- 30 Pekeris C.L., Phys. Rev. 112, 1649 (1958)

Mein Dank gilt:

Herrn Prof. Dr. Hanns Ruder für die Überlassung dieses interessanten Themas und für seine ständige Bereitschaft, die anstehenden Fragen zu diskutieren, sowie für das mir entgegengebrachte Vertrauen.

Herrn Dr. W. Rösner für viele klärende Gespräche zum Problem des Einelektronensystems und für die Zurverfügungstellung der Energiewerte der Zustände des Einelektronensystems.

Den Herren Dr. H. Herold, Dr. M. Soffel und Dr. G. Wunner für manch klärende Diskussion und Unterstützung.

Den Herren cand. phys. K. Herz und J. Tworz für die Übernahme von Zeichenarbeiten.

Meiner Frau für die Ausführung der Schreibarbeiten und für ihr allzeitiges Verständnis während der Fertigstellung dieser Dissertation.

Lebenslauf

Angaben zur Person:

Name: Thurner, Günther
Geburtsdatum: 16.7.1952
Geburtsort: Nürnberg
Staatsangehörigkeit: deutsch
Eltern: Friedrich Thurner und
Frau Anna Thurner, geb. Rabenstein
Familienstand: seit dem 16.4.1982 verheiratet mit
Ruth Thurner, geb. Ehrlich, 1 Kind
Wohnort: Bienengartenstr. 18
8501 Schwaig

Schulausbildung/Studium:

1958 - 1962 Volksschule in Schwaig
1962 - 1971 Hans-Sachs Gymnasium Nürnberg
1971 Abitur
1971 - 1978 Physikstudium an der Universität
Erlangen-Nürnberg
15.2.1974 Diplom-Vorprüfung für Physik
17.5.1974 Diplom-Vorprüfung für Mathematik
20.7.1978 Diplom-Hauptprüfung für Physik

Berufliche Tätigkeiten:

4.9.1978 - 31.3.1981 wissenschaftlicher Angestellter im
Entwicklungsbereich der Firma
Diehl GmbH & Co.
1.4.1981 - 31.5.1982 wissenschaftlicher Angestellter bei
Herrn Prof. Dr. Hanns Ruder
seit 1.6.1982 wissenschaftlicher Angestellter der
Universität Tübingen

